河流水质数学模型及其模拟计算

傅国伟 编著

中国环境科学出版社

河流水质数学模型
及其模拟计算

傅 国 伟 编著

中国环境科学出版社

1 9 8 7

内 容 简 介

本书编写目的在于介绍水质数学模型及水质预测计算的专业知识，许多实例内容丰富，在工作中可根据实际参考使用。内容分为三章，第一章简要阐明建立水质数学模型所依据的“污染物在水体中迁移转化过程”。第二章介绍了常用的一维河流（包括河口）水质模型，一维河流有限差分和有限元水质模型以及二维河流水质模型的推导、求解和计算。第三章介绍了建立常用河流水质模型的关键步骤——“模型参数的估值”。

本书可供环境工程、环境科学、水利工程、环境监测、给水排水等专业的从事水环境工作的科研、设计、规划、管理、教学工作者参考。

河流水质数学模型及其模拟计算

傅国伟 编著

责任编辑 李玲英

中国环境科学出版社 出版

北京崇文区东兴隆街69号

北京市建外印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行　　各地新华书店经售

1987年7月第一版　　开本 850×1168 1/32

1987年7月第一次印刷　　印张 8 3/4 插页1

印数 0001—5,000　　字数 195,000

ISBN 7-80010-002-2/X0012

统一书号 13239·0037

定价 2.50 元

绪 论

环境质量的预测已成为当前开展环境规划管理、进行污染综合防治方面所不可缺少的基础工作。水环境质量的预测则是其中具有普遍意义的一项重要内容。

无论是对开发建设的工程项目，进行水环境质量的预断评价，还是对连续的或突发性的排污进行水质影响的描述和评价；也无论是在制订地区水污染物排放标准或确定水体各排污口的容许排污量和应削减率，以及在制订区域水污染控制系统规划或进行污染控制的系统分析等过程中，都涉及到水环境质量在空间和时间上的变化问题，都需要解决水质的定量预测问题。因此，水质预测的技术和方法受到了许多环境工作者的关注。

如果在某一河流系统内，通过实地试验想直接获得有关各种水质变化预测的资料，一般地说是不可能的。因为在一条清洁的或轻微污染的河流中进行各种状态下人为污染物的测量和研究，需要倾倒大量的污染物，还需要停止污染物的排放，以取得预测所需要的边界条件，而这样做会造成长期难以恢复的破坏，因此原则上是不允许的。特别是对有毒、有害物进行这种临界状态试验更是被严格禁止的，更何况，在自然状态下进行这类试验，因其规模巨大将消耗相当可观的人力、财力和物力。由于以上这些原因，人们往往采用“模拟”的方法来研究水质的变化规律。这种研究方法是根据实际监测资料所提供的部分信息，通过逻辑推理、数理分析或实物模型实验建立起能代替真实系统的模型，然后用模型进行水质变化规律的研究。这种利用水质模型进行研究的方法和过程，称之为“水质模拟”。它也可以理解为一种试验，只不过这种试验并不是在河流中而是在水质模型上进行的。

水质模拟的方法，可因其所用模型的不同而区分为物理模拟、

电模拟和数学模拟。如一切定量的研究都要应用数学方法来表达一样，水质的物理模拟和电模拟本身又不能脱离数学模拟，都涉及到数学模型及其应用。同时数学模型的机理、参数估值与识别则又往往要依靠物理模拟、电模拟或现场实测的结果才能确定。现代的水质模拟技术是各种手段和各种学科的综合技术。

用缩小比例的物理模型进行水质模拟的实验，往往要消耗较多的人力、物力，在技术上，除了模拟河流的局部水文、水力学特性外，在模拟水质方面大多难以达到相当的真实性。因此，国际上对水质的数学模拟试验给予了普遍的重视。与其他形式的模拟相比，这种非实物数学模拟不需要过多的专门设备和工具，可以节省大量的试验费用。现代数学模拟的主要工具是数字电子计算机，由于电子计算机运算速度很快而又准确，因此水质数学模拟的速度是任何其它模拟方法所不能比拟的。这对于水质的预测和控制是很有利的。利用电子计算机进行的模拟计算，可以在一个受控的环境中进行各种状态及其影响因素的考察，特别是一些临界状态（或危险状态）的试验，在真实系统中，甚至在物理模型中都难以实现，而在数学模型上却可以"随心所欲"地进行研究，可以在深度和广度上取得更有意义的模拟和预测数据和资料。数学模拟的灵活性也远胜于其它模拟方法，它可以根据各种各样的需要和可能作出多方案的模拟和比较，为决策者提供大量的信息和多种选择的可能。在物理模拟和电模拟中，进行两个变量的试验就会遇到困难，进行两个变量以上的试验就几乎不可能了。而在数学模拟中却可以不受变量数目的限制，同时考察多变量因素的影响。

由于水质数学模型推导方式的不同，可区分为理论模型、经验模型和半经验、半理论模型三种类型。理论模型（也称为机理模型或"白箱"模型）是把河流系统中所包含的现象过程，根据物理、化学和生物学的各种定律以及水体中污染物迁移转化的原理，按照数学知识和边界条件推演出的数学方程。经验模型（也称为统计模型或"黑箱"模型）它不考虑系统内部的现象过

程，即不必弄清过程中的机理，而直接从系统的输人（如排污）和输出（水质）的实测数据通过统计归纳来建立其定量关系。必须注意，由统计建立起来的经验模型，只能在实测数据的条件和范围之内才能应用。实用上，使用已建立的、可以求解计算的理论模型，一般是省时、省力的。但由于环境系统的复杂性，要完全确定性地阐明其物理、化学、生物学等综合现象是很困难的。因此，目前用得最多的水质数学模型既不是“白箱”、也不是“黑箱”，而是介乎两者之间的“灰箱”结构。此种模型也可称之为“准理论模型”或“半经验模型”。它是对理想的现象机理模型，按实用的目的作出各种简化和近似，并引人某种由现场实测数据统计得来的经验公式作为部分补充。

水质数学模型及其模拟预测也存在着它的局限性。由于污染物在水体中迁移转化规律还有许多不清楚之处，很多过程目前还难于用数学方法表达，对这些问题就很难进行水质数学模拟。在可以进行水质数学模拟的水质系统中，其水质数学模型是经过对真实系统的适当简化后才建立的。简化后的模型必然相对孤立地分析某些因素，而忽略了其它内容的因素和条件。这种抽象和简化，既是必要的，也是在一定条件下所允许的，它反映了河流水质系统的基本问题及其基本特性。但如果对河流水质系统的客观条件认识不够全面和深入，就有可能抓不住主要矛盾，使水质数学模型不切实际，使预测计算失真。这就需要在进行水质模拟之前，深入研究分析当时、当地的具体条件，并考虑社会、政治、经济和技术等方面的需要和可能，选用并建立范围适当、条件符合的数学模型进行有效的水质模拟预测。还应注意河流中排污状况和水文条件等客观实际在不断变化，据此我们对已建立起来的模型进行必要的检验和修正，使其符合变化了的实际情况。

总之，我们既要积极地应用水质数学模拟的手段，又要慎重地评价数学模拟的方法。要正确地按照合理的步骤进行水质的模拟预测。

本书编写的目的在于介绍水质数学模型及水质预测计算的实际应用。全书共分三章。第一章：简要阐明建立水质数学模型所依据的“污染物在水体中迁移转化过程”原理，使读者具备进行水质预测的基础知识。第二章以河流（包括河口）水质模型为对象，较详尽地介绍常用的一维河流水质模型的各种解析解模型的推导来由、求解方法、内容和特性以及使用条件，以使读者便于选择应用；还介绍了一维河流（包括河口）有限差分和有限元水质模型，以及二维河流水质模型的推导、求解和计算，使读者对解决较复杂的水质预测问题，具有一定的知识和能力。第三章对建立常用河流水质模型的关键步骤——“模型参数的估值”进行了阐述，介绍了单一参数分别估算的各种方法及其经验公式、较新的多参数以及最优估值方法，包括常用的梯度法搜索最优参数和“计算机扫描计算-图解-梯度搜索法”搜索最优参数，后者是作者新研究开发的估值方法，它具有较高的计算精度，避免了多参数在同时最优估值中存在的因不能保证求得最优值，因此带来的误差大、结果各不相同的问题。此外还介绍了“复合形法”搜索有限差分和有限元河流（口）水质模型最优参数的方法。

为了读者易于理解和运用水质模型进行模拟预测计算，本书在各有关章节提供了共52个有典型意义的计算例题。对重要的计算方法和过程提供了详细的计算程序框图。有关这些计算程序和算例均已编成可供直接使用的计算机软件（分别编制成可在袖珍计算机和微处理机上应用的专用计算机语言设计程序）并由有关《软件公司》作为通用软件提供用户。

本书编写过程中得到清华大学环境系统工程教研室各同志和其他同行的帮助和指教。谨致谢意。

由于编者水平有限，书中的缺点和错误在所难免，敬希读者批评指正。

编　者

1985年6月

目　录

第一章　污染物在河流中的迁移转化过程

水质数学模型（简称为“水质模型”）是水体中污染物随空间和时间迁移转化规律的描述。水质模型的正确建立依赖于对污染物在河流中迁移转化过程的认识以及定量表达这些过程的能力。

污染物在河流中的迁移转化是一种物理的、化学的和生物学的联合过程。这些过程既与污染物本身的特性有关，也与外界的许多条件密切联系。

第一节　污染物在河流中的迁移过程

一　一般污染物在河流中的迁移

就污染物在河流中的物理迁移过程而言，它可以包括：污染物随河水的推移，污染物与河水的混合，与泥沙悬浮颗粒的吸附和解吸、沉淀和再悬浮，污染物的传热与蒸发以及底泥中污染物以泥沙为载体的输送等。

对于一般的污染物(包括无机的和有机的)的溶解状态或胶体状颗粒来说，它们与河水的混合作用和混合程度是十分重要的过程。因为当废水排入河道后，废水中的污染物在水体中与河水相混的同时，污染物本身得到了分散和稀释，这种过程起着“自净作用”。混合作用主要由河水的推流平移（advection）、湍流扩散或紊流扩散（turbulence diffusion）和弥散或离散（dispersion）所决定的。

所有流动的水体，其水流都是湍动或紊动的，如果观察试验

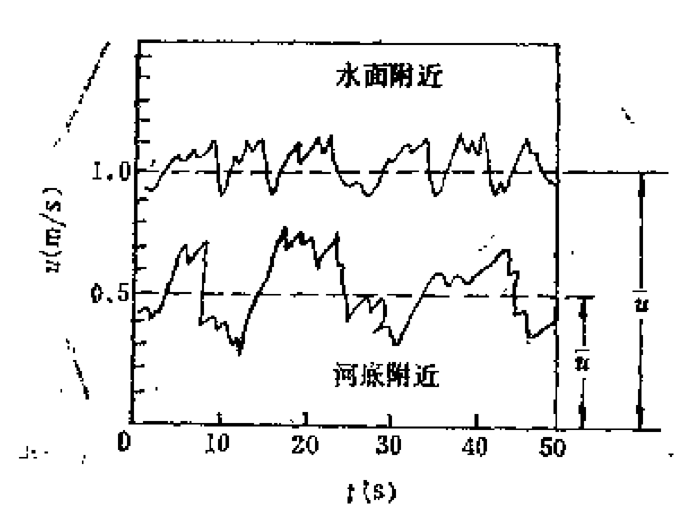


图 1-1　湍流流场中河水流速的脉动

明渠内流动的水体中，某一点的瞬时纵向流速，可以看出该点的流速 u 是随时间而脉动变化的，（如图1-1）。水面附近与河底附近上、下两点的脉动幅度有所不同，河底瞬时流速的脉动振幅较大。图中的虚线是平均线，代表时平均纵向流速（又称时均流速 $\bar{u}$ ），它是一个常数，而点瞬时流速u则随时间在 $\bar{u}$ 值附近脉动变化。在一定的时间间隔内，时均流速 $\bar{u}$ 可表达为

$$\bar{u}=\frac{\int_0^t u\mathrm{d}t}{t} \qquad (1\cdot1)$$

式中：u——点瞬时流速；

$\bar{u}$——时段 t 的点时均流速；

时间间隔 t 的取值应长到足以消除湍流脉动的影响。实际上，对一般河流时段 t 取几分钟的平均值，即可获得纵向时均流速 $\bar{u}$。

同样，在横向y坐标和竖向z坐标方向上的流速也存在着点瞬时值与时平均值，即 v 和 $\bar{v}$ ，w和$\bar{w}$。

点瞬时流速与点时均流速之间的关系可分别表达为

$$u=\bar{u}+u' \qquad (1\cdot2)$$

$$v=\bar{v}+v' \qquad (1\cdot3)$$

$$w=\bar{w}+w' \qquad (1\cdot4)$$

式中：u'，v'，w'——纵向、横向、竖向坐标方向上点瞬时流速与时均流速间的偏差量，称为脉动流速或脉动增量。

对于浓度c、密度ρ、温度T和压力p等参数也存在着点瞬时值与点时均值，它们间的关系可分别写成

$$c=\bar{c}++c' \tag{1·5}$$

$$\rho=\bar{\rho}+\rho' \tag{1·6}$$

$$T=\bar{T}+T' \tag{1·7}$$

$$p=\bar{p}+p' \tag{1·8}$$

式中：c'，ρ'，T'，p'——点瞬时值与点时均值的浓度、密度、温度和压力的脉动偏差量。

河流推流平移运动的通量为

$$\begin{cases} F_x=\bar{u}\ \bar{c} \\ F_y=\bar{u}\ \bar{c} \\ F_z=\bar{w}\ \bar{c} \end{cases} \tag{1·9}$$

式中：F_x,F_y,F_z——x、y、z坐标方向的平流通量，〔$ML^{-2}T^{-1}$〕；

$\bar{u}$，$\bar{v}$，$\bar{w}$ ——河流某点在x，y，z坐标方向上的时均速度分量，〔LT^{-1}〕；

$\bar{c}$——河流某点（x、y、z）污染物的时均浓度。〔ML^{-3}〕。

湍流扩散是湍流流动的重要特征。湍流扩散是指湍流流场中由污染物浓度梯度所引起的污染物在水体中的分散现象。它是任意点污染物在湍流流场中随机脉动的结果。其大小可用湍流扩散系数D_x、D_y、D_z来表征。一般情况下，对静止水体或层流流场中，分子的热扩散系数为$0.014cm^2/s$；而对雷诺数$Re=10^4$左右的湍流流场，其湍流热扩散系数达到$3.36cm^2/s$，后者为前者的240倍，可见湍流扩散的作用相对分子扩散来说是主要的。湍流扩散的通量，可采用类似表达分子扩散通量的费克扩散公式表达

$$\begin{cases} I_x=-D_x\dfrac{\partial\bar{c}}{\partial x} \\ I_y=-D_y\dfrac{\partial\bar{c}}{\partial y} \\ I_z=-D_z\dfrac{\partial\bar{c}}{\partial z} \end{cases} \tag{1·10}$$

式中：I_x、I_y、I_z——x，y，z坐标方向上的湍流扩散通量，〔$ML^{-2}T^{-1}$〕；

D_x、D_y、D_z——x、y、z坐标方向上的湍流扩散系数，$[L^2T^{-1}]$；

$\bar{c}$—河流中某点（x，y，z）污染物的时均浓度，$[ML^{-3}]$。

弥散或离散现象是由于横断面上各点的实际流速不相等而引起的污染物分散现象。流速分布的不均匀则是由于河底和河岸的阻力所引起的，也即形成所谓的剪切流动。弥散现象可用图1-2来阐明。由于河底切应力的影响，在横断面上的流速$\bar{u}$竖向分布如图1-2（A）所示，而横断面的平均流速则$\bar{\bar{u}}$为。在$x=0$处的初始（$t=0$）瞬时平面源（A），沿河（纵向）各断面的时平均浓度分布情况如（B）所示。经过一个单位时间（$t=t'$），原来在$x=0$处的平面流体质点移到了速度分布线处形成如（C）的污染物分布，此时沿纵向（沿x）各断面的平均浓度就相应从（B）变

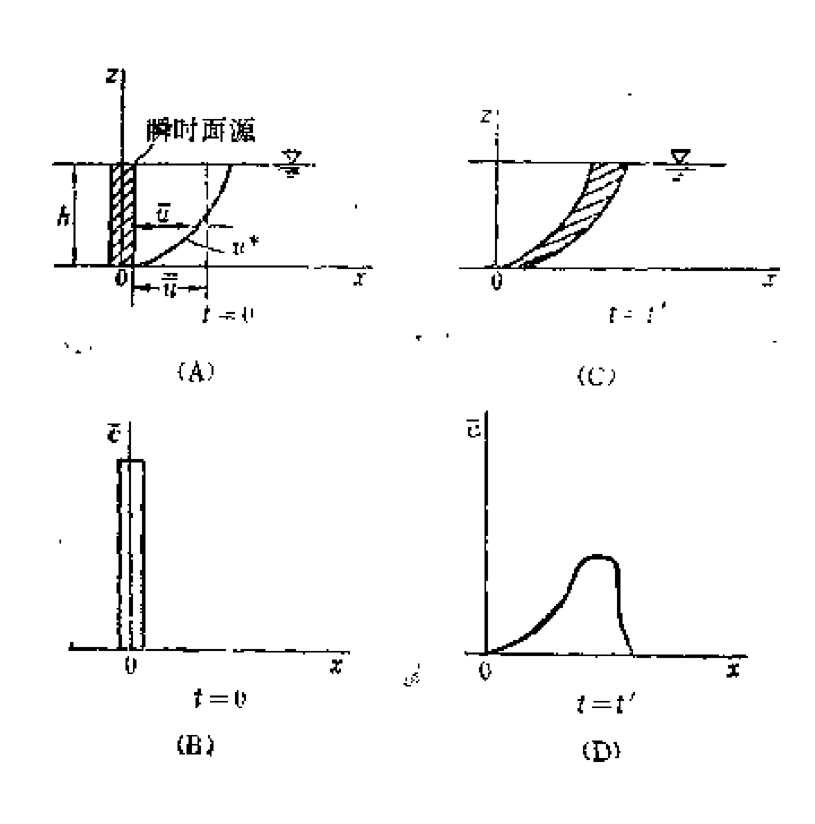


图 1-2　纵向弥散现象示意图

（A）$t=0$时瞬时面源与流速的$\bar{u}$的分布　（B）$t=0$时浓度$\bar{c}$分布

（C）$t=t'$时污染物的分布　（D）$t=t'$时浓度$\bar{c}$分布

为（D）所示。显然污染物是沿纵向被分散开了。如果我们用点的时均流速$\bar{u}$的前进来观察各处的浓度变化，只能看到湍流扩散作用；如果用横断面的平均流速$\bar{\bar{u}}$的前进来观察污染物浓度的变化，则出现了弥散现象。这是由于我们采用了空间平均值，从而产生了与此平均值相比的点实际时均值之间的偏差。若定义横断面竖向的流速与浓度的平均值为

$$\bar{\bar{u}} = \frac{1}{h} \int_0^h \bar{u}(y)\,dy \tag{1·11}$$

$$\bar{\bar{c}} = \frac{1}{h} \int_0^h \bar{c}(y)\,dy \tag{1·12}$$

式中：$\bar{u}$、$\bar{c}$——竖向（z坐标）各点的时均流速和浓度；

h——水深。

点时均流速和点时均浓度与断面平均流速和浓度之间的关系可表达为

$$\bar{u} = \bar{\bar{u}} + u^* \tag{1·13}$$

$$\bar{c} = \bar{\bar{c}} + c^* \tag{1·14}$$

式中：u^*，c^*——点时均流速和浓度与断面平均流速和浓度的偏差量。

由于河流横断面上的竖向和横向的流速分布不均匀，引起了污染物的分散输送，加速了污染物在纵向的混合。而垂直于纵向流动方向（y和z方向）的扩散作用又使横断面上的浓度分布趋于均匀，这又减弱了纵向的混合作用，这一对作用的结合可称为纵向弥散，它控制了纵向混合过程。当两者处于动平衡时，可用下述公式表达其纵向弥散通量

$$J_x = u^* c^* \tag{1·15}$$

$$J_x = -E_x \frac{\partial \bar{\bar{c}}}{\partial x} \tag{1·16}$$

式中：E_x——纵向弥散系数，〔L^2T^{-1}〕，表征纵向弥散作用的大小；

u_*、c_*——与断面平均值相比的偏差量。

总之，正是由于上述三种作用，使废水排入河流后，在河流中一般呈现为三个不同混合状态的区域或阶段，即竖向混合区、横向混合区和纵向混合区。从排污口到污染物在水深方向（z方向）均匀混合，为竖向混合区。这个区域的混合过程十分复杂，它涉及到废水与河水之间的质量、动量与热量的交换以及密度差的掺混等作用，是三个方向（三维变量）的变化问题，需要用喷射流理论进行具体分析研究才能建立其水质模型。对于浮力大小为中等（即非喷流）和非射流排放的情况，竖向混合所需要的长度是与河流平均水深h成正比（约为水深的几十倍到一百倍），由于天然河流的水深一般都很浅，所以竖向混合区的长度相对是很短的。从竖向均匀混合到河流横向（河宽y方向）污染物开始均匀混合的区域为横向混合区。它是一个两个方向（二维变量）的问题。由于天然河流的河宽与水深的比一般都大于10，故横向混合的长度相对要长得多，它与河宽的平方成正比，有时需要几公里以至几十公里。从横向均匀混合以后的区域，称为纵向混合区，此时，沿河流流动方向（x方向）上各横断面之间的河水断面平均浓度偏差要比横断面上各点的河水浓度偏差大得多。在这个区域内，我们只须考虑河流纵向各断面平均浓度的变化就可以了，即属于一维变量问题。

二　重金属在河流中的迁移转化

重金属在河流中的迁移问题，许多年来国际上已作了很多的研究和观察。研究的结果表明：自排污口排出的重金属均累积于排污口下游极有限的距离内，通常仅为几百米范围的底泥中，下游河水中重金属含量均接近于本底值。虽然只是在一段很短距离内的底泥沉积物中积累了重金属，但从水体的总体来看，仍然存在着污染问题，重金属可以从底泥沉积物进入底栖生物，再通过肉食鱼类而转移到人体内，如著名的日本水俣湾，其海水中Hg^{2+}

的含量并不高，但大量的汞沉积于海湾的底泥中，在微生物的作用下无机汞转化为甲基汞，又经过上述食物链而危及人体健康。因此，国际上对于这类有害物提出了总排放量的要求，规定要在生产车间或生产设备的排出口就加以严格控制，不允许稀释排放，我国对此也作了相应的规定。与此同时，国内外也还重视研究重金属在底泥沉积段中的转化机制及其稳定性问题。

重金属在水体中是以分子、离子、胶体和颗粒态存在，它随水—悬浮物—底泥而迁移到下游。其迁移过程极为复杂。可以区分为溶解态、颗粒态及以底泥为载体的不同输送形式。这三种不同形式又彼此相互联系、相互制约。

1）从溶解态重金属在水中的迁移变化来看，它的影响因素除有推流平移运动和扩散弥散运动外，还涉及到重金属溶解态和颗粒态之间的相互转化以及重金属在底泥中和水相中的转化问题。由颗粒态重金属转为溶解态重金属的变化量可按下式表达

$$W_1 = k_s\theta\ (k_b q - c) \tag{1·17}$$

式中：W_1——由颗粒态转为溶解态的重金属变化量，$[ML^{-3}T^{-1}]$；

k_b——溶解态和颗粒态重金属浓度的分配系数，（平衡条件下为溶解态与颗粒态浓度比）；

k_s——颗粒态转为溶解态的速率系数，$[T^{-1}]$；

q——颗粒态重金属浓度，$[ML^{-3}]$；

c——溶解态重金属浓度，$[ML^{-3}]$；

θ——单位水体中悬浮颗粒量，$[L^3L^{-3}]$。

重金属由底泥转到水相中的变化量可用下式表达

$$W_2 = k_W(f_1 c_M - c) \tag{1·18}$$

式中：W_2——由底泥转到水相中的重金属变化量，$[ML^{-3}T^{-1}]$；

k_W——底泥解吸出溶解态的重金属解吸速率系数，$[T^{-1}]$；

c_M——底泥中重金属浓度，$[ML^{-3}]$；

f_1——水相浓度与底泥浓度的分配系数。

2）从颗粒态重金属在水中的迁移变化来看，它的影响因素

除有水流平移运动和扩散、弥散运动外，还涉及到水相中重金属在溶解态和颗粒态之间的相互转化，重金属从水相沉降到底泥以及从底泥的再悬浮问题。

由溶解态到颗粒态的重金属变化量为

$$W_3 = k_s\ (k_b c_W - \theta c) \tag{1·19}$$

式中：W_3——由溶解态转到颗粒态的重金属变化量,〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

c_W——单位水相中的颗粒态重金属量，〔ML^{-3}〕，

$$c_W = \theta_s q。$$

由于水相中悬浮物沉到底泥引起的重金属变化量为

$$W_4 = k_D u^m c_W \tag{1·20}$$

式中：W_4——由水相沉降到底泥的重金属变化量，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

k_D——沉降速率系数，〔L^2T^{-3}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

m——指数常数（一般$m = -2$）。

由底泥再悬浮重金属变化量为：

$$W_5 = k_E u^n c_M \tag{1·21}$$

式中：W_5——由底泥再悬浮的重金属变化量，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

k_E——再悬浮速率系数，〔$L^{-4}T^3$〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

n——指数常数，（$n = 4$）。

3）底泥中重金属的迁移变化，一方面由于泥沙为载体而引起推移输送，另一方面又由悬浮物的沉降而得到补充，由再悬浮而减少。同时还由于解吸，有一部分转入溶解态。

由泥沙推移引起的重金属变化量为：

$$W_6 = \frac{\partial q_b c_M}{\partial x} \tag{1·22}$$

式中： W_s——泥沙推移引起的重金属变化量，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

q_b——输沙率，〔LT^{-1}〕。

上述各种迁移过程及其相互影响，也必然随重金属污染物的性质以及水环境本身的特性而异。要建立河流中重金属污染物与水质之间的定量关系，还有待于开展大量的研究工作。与此同时，对底泥中重金属的质量标准问题也是必须研究解决的迫切问题。

第二节 有机物在河流中的衰减变化

有机物在河流中迁移的同时发生衰减变化，是一种有重要意义的过程。正是由于这些有机物大量排入水体，在水体中进行氧化分解，使河水的溶解氧不断消耗，使鱼类以至原生动物死亡，细菌大量繁殖，生态循环遭到破坏。当河水中没有溶解氧时，有机物受到厌气性细菌的还原作用而生成甲烷气，同时水中存在的硫酸根离子将由硫酸还原菌的作用而变成硫化氢，从而引起水体发臭；除此之外，喹嗪、吲哚和硫醇等的分解也会产生恶臭。有机物在水体中所引起污染是具有普遍意义的。

一般有机物在好气条件下其生化降解过程如图1-3所示：

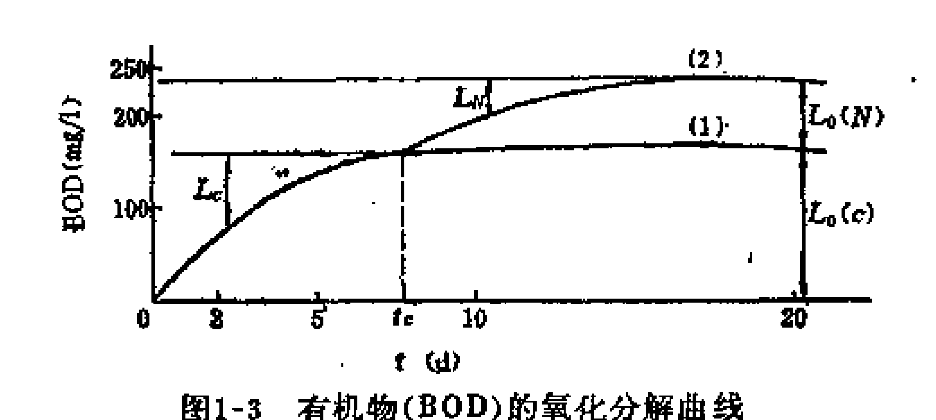


图1-3 有机物(BOD)的氧化分解曲线

(1)——含碳化合物分解曲线，　(2)——硝化曲线

在水体中，首先是含碳化合物氧化分解（以CBOD表示），如曲线（1），然后氮化合物也发生氧化分解（以NBOD表示），如

曲线（2）。前者是好气菌对碳化合物的氧化；后者（称为硝化阶段）是好气菌对氨的氧化。其拐点约发生在10天左右。对于像活性污泥法处理污水等有机物浓度高的情况，硝化菌的作用开始是被抑制的，所以就出现上述二阶段的现象。而对于BOD浓度较低的河流，有机污染物一进入河水中硝化作用会马上发生。

一 含碳化合物的氧化

可以按一级动力学反应

$$\frac{dL_c}{dt} = -k_1 L_c \tag{1·23}$$

即衰减反应与剩余BOD量成正比例。

积分公式为

$$L_c = L_{c(0)} e^{-k_1 t} \tag{1·24}$$

式中：$L_{(0)}$，L_c——$t=0$和$t=t$时CBOD的浓度，〔ML^{-3}〕；

k_1——CBOD的衰减速率系数（或称"耗氧速率系数"），〔T^{-1}〕，其物理意义是：单位时间内碳BOD的衰减百分率。

关于CBOD的衰减系数k_1，曾进行过许多研究。日本南部等人曾研究了k_1与初始BOD浓度（L_0）的关系。将污水用琵琶湖水及蒸馏水稀释后的水样进行测定，所得结果如图1-4所示。说明：在$0<L_0<40$mg/l的范围内，k_1随L_0的增加而有所增大，在$L_0>40$mg/l时，k_1基本为一固定数值。

许多研究者指出，实验室内测定的$k_{1(实验)}$与实际河流中的$k_{1(河流)}$有很大的差别。日本建设省下水道研究室对日本隅田川的k_1值试验研究结果(见表1-1)，$k_{1(河流)} \doteq 2.31 k_{1(实验)}$。日本南部在1959年实验室测定淀川的$k_{1(实验)}$为0.20和0.26，河水实测值$k_{1(河流)}$则达0.72和0.88。麦克凯（Mckee）等人认为这种差别是由于实际河流中与实验室条件还存在着：沉淀、吸附、凝聚、河床状况对生物学的影响以及有机酸的挥发等作用的区别。

表1-1　日本隅田川的k_1(实验室)k_1(河流)值

采样地点	东京湾	清　洲	永　化	两　国	干　住	小　台	志　茂
k_1(实验室)	0.076	0.033	0.195 0.143	0.160 0.142 0.112 0.140	0.093	0.072 0.210	0.165
k_1(河　流)	0.161	0.070	0.358	0.294	0.197	0.299	0.328

〔注〕k_1（河流）指水温　18.1°C，BOD_5＝8.3—22.0 mg/l。

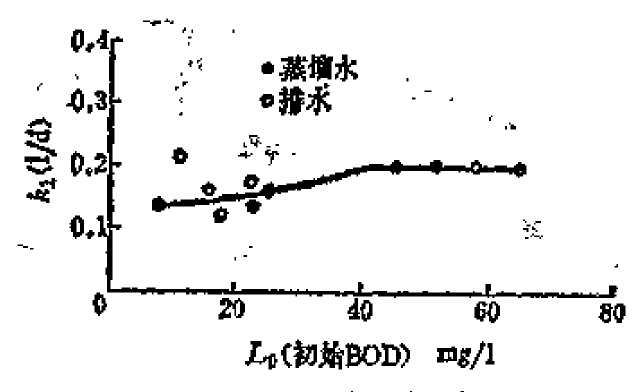


图 1-4　污水稀释后测定结果

二　硝化反应

天然水体中，含氮化合物在一定条件下，经过一系列生物反应过程，进行着十分复杂的循环过程。硝化过程是这种复杂循环过程的重要组成部分（见图1-5）。

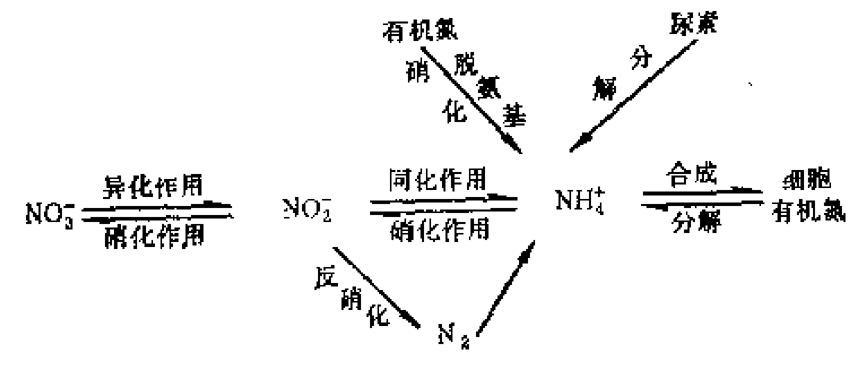


图 1-5　含氮化合物在天然水中的循环过程

硝化过程是一个生化耗氧过程，它受到许多因素的影响。其中温度、pH和细菌等是主要影响因素，溶解氧是硝化过程发生的必要条件。一般当水中的溶解氧在0.75～0.85mg/l以上时，排入水体中的氨氮（NH_3-N）或排入水体中的有机氮经水解而产生的氨氮，可发生两步连贯反应

$$NH_3 + 1\frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{\text{亚硝化菌}} NO_2^- + H^+ + H_2O + \Delta H_1 \quad (1 \cdot 25)$$

或 $$NH_4^+ + 1\frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{\text{亚硝化菌}} NO_2^- + 2H^+ + H_2O + \Delta H_1 \quad (1 \cdot 26)$$

$$NO_2^- + \frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{\text{硝化菌}} NO_3^- + \Delta H_2 \quad (1 \cdot 27)$$

总反应

$$NH_3 + 2O_2 \longrightarrow NO_3^- + H^+ + H_2O + \Delta H \quad (1 \cdot 28)$$

或 $$NH_4^+ + 2O_2 \longrightarrow NO_3^- + 2H^+ + H_2O + \Delta H \quad (1 \cdot 29)$$

式中：$\Delta H = \Delta H_1 + \Delta H_2$是反应热，$\Delta H_1 = -243\times10^3$—$-352\times10^3$J/mol，$\Delta H_2 = -63\times10^3$—$-105\times10^3$J/mol。

所谓“硝化过程”是指水环境中的含氮化合物在特定的自养菌作用下，氨氮和亚硝酸盐氮被溶解在水中的氧氧化成硝酸盐。由上述化学反应方程计算可知，每毫克氨氮完全氧化成亚硝酸盐氮需要3.43mg氧；每毫克亚硝酸盐氮完全氧化成硝酸盐氮则需1.14mg氧。故理论上完全的硝化过程的耗氧量可表达为：

$$NBOD = f_{n1}\ [NH_4^+ - N]_{ox} + f_{n2}\ [NO_2^- - N]_{ox}$$

$$= (3.43 + 1.14)\ [NH_4^+ - N]_{ox} + 1.14\ [NO_2^- - N]_{ox}$$

所以 $$NBOD = 4.57\ [NH_4^+ - N]_{ox} + 1.14\ [NO_2^- - N]_{ox} \quad (1 \cdot 30)$$

式中：f_{n1}、f_{n2}——氨氮氧化成亚硝酸盐氮和亚硝酸盐氮氧化成硝酸盐氮的耗氧系数，[mg（O_2）/mg（N_2）]；

[NH_4^+-N]、[NO_2^--N]——被氧化的氨氮和亚硝酸盐

氮的浓度，（mg/l）。

一般河水中〔NH_3-N〕浓度不高，硝化过程、氨氮衰减过程和亚硝酸盐氮衰减过程，可认为符合一级反应动力学，即：

$$\frac{dL_N}{dt} = -k_N L_N \qquad (1\cdot31)$$

$$\frac{dL_{N1}}{dt} = -k_{N1} L_{N1} \qquad (1\cdot32)$$

$$\frac{dL_{N2}}{dt} = -k_{N2} L_{N2} \qquad (1\cdot33)$$

式中：L_N，L_{N1}，L_{N2}——NBOD、氨氮、亚硝酸盐氮的浓度，〔ML^{-3}〕；

k_N，k_{N1}，k_{N2}——NBOD、氨氮、亚硝酸盐氮的衰减速率系数，〔T^{-1}〕。

当初始条件为$L_{N(0)}$、$L_{N1(0)}$，$L_{N2(0)}$时，NBOD硝化、氨氮衰减过程和亚硝酸盐氮衰减过程的积分公式分别为

$$L_N = L_{N(0)} e^{-k_N t} \qquad (1\cdot34)$$

$$L_{N1} = L_{N1(0)} e^{-k_N t} \qquad (1\cdot35)$$

$$L_{N2} = L_{N2(0)} e^{-k_{N2} t} \qquad (1\cdot36)$$

据文献推荐NBOD的衰减速率系数k_N在20℃时可粗估为0.1d^{-1}。据英国水质污染研究所的实验室试验，k_N与水中溶解氧含量有一定关系，但当溶解氧浓度高于3mg/l时，k_N基本不随溶解氧含量变化。

1972年A.R.沃尔科特（A.R.Wolcott）和G.G.内柯斯（G.G.Nakos）报道了它们试验的结果（见"Plant Soil" 36，521，1972）：当氨氮浓度较高时，L_N随反应时间将呈线性减少的关系，即此时硝化反应是符合零级反应动力学的。

三　脱氮反应

当水中溶解氧消耗殆尽时，水中硝酸盐氮将被还原菌还原成

亚硝酸盐氮，最后生成氮，此过程称为脱氮反应。它是与硝化反应相反的过程。脱氮反应过程可表示如下：

脱氮　$HNO_3 \rightarrow HNO_2 \rightarrow H_2N_2O_2 \rightarrow NH_2OH \rightarrow NH_3$　　(1·37)

硝化　$NH_3 \rightarrow NH_2OH \rightarrow H_2N_2O_2 \rightarrow HNO_2 \rightarrow HNO_3$　　(1·38)

脱氮过程在一定条件下可产生氮或氧化亚氮 N_2O，但并不产生恶臭。

威特兰(Wheatland)曾详细地进行了脱氮作用的研究。采用如图1-6所示的连续实验装置。研究结果说明：当实验水样从完全厌气性转变为有溶解氧的条件下，水中溶解氧浓度达到0.53mg/l时，脱氮作用就停止，当水中溶解氧浓度超过0.85mg/l时，氮的氧化减弱；实验水样先将溶解氧浓度降低到脱氮状况，然后再开始逐渐提高溶解氧浓度到停止脱氮。当溶解氧为0.31mg/l时开始发生脱氮，一直到溶解氧浓度为0.75mg/l时才停止脱氮。

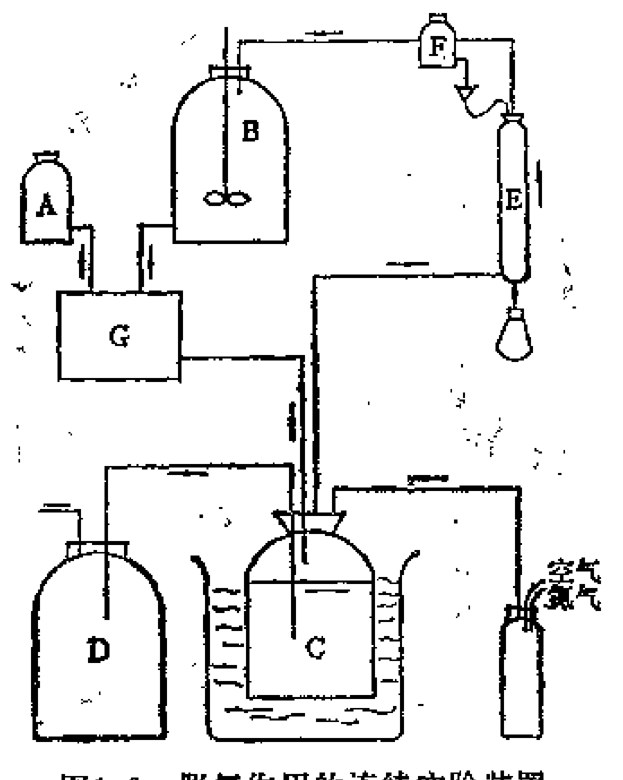


图1-6　脱氮作用的连续实验装置

A——KNO_3溶液　B——稀释污水
C——25℃恒温槽　D——收集瓶
E——氨吸收塔　F——HCl瓶
G——混合槽

试验还说明硝酸脱氮反应的温度系数与BOD是一致的。

四　反应速率k_1和k_N与水温的关系

（一）k_1与水温的关系

$$k_{1(T)} = k_{1(20°C)} \quad \theta^{(T-20)} \tag{1.39}$$

式中： $k_{1(T)}$——水温为T℃时 CBOD 的衰减速率常数，〔T^{-1}〕；

$k_{1(20℃)}$——水温为20℃时CBOD的衰减速率常数，〔T^{-1}〕；

θ——在一定温度范围内，k_1的温度系数。其值可由表1-2查得。表中所列的塞里奥特（Theriault）试验值$\theta = 1.047$，由于它是在较宽的温度范围内取得的，故常被采用。

表 1-2 各种温度系数值

θ 值	温度适用范围(℃)	试验者
1.047	9—30	塞里奥特（Theriault）
1.065	5—20	穆尔（Moore）
1.042	15—30	戈塔斯（Gotass）
1.109	5—15	戈塔斯
1.045	10—30	奥弗尔德（Orfocrd）
1.056	20—30	施罗法（Schroepfer）
1.135	4—20	施罗法

（二）k_N与水温的关系

$$k_{N(T)} = k_{N(20℃)} \cdot (1.017)^{(T-20)} \tag{1·40}$$

$$k_{N1(T)} = k_{N1(20℃)} \cdot (1.088)^{(T-20)} \tag{1·41}$$

$$k_{N2(T)} = k_{N2(20℃)} \cdot (1.058)^{(T-20)} \tag{1·42}$$

式中：$k_{N(T)}$，$k_{N(20℃)}$——水温为T℃和20℃时NBOD的衰减速率常数；〔T^{-1}〕；

$k_{N1(T)}$，$k_{N(20℃)}$——水温为T℃和20℃时氨氮氧化的衰减速率常数；〔T^{-1}〕；

$k_{N2(T)}$，$k_{N2(20℃)}$——水温为T℃和20℃时亚硝酸盐氮氧化的衰减速率常数，〔T^{-1}〕；

诺尔斯（Knowles）等人曾使用以下的经验式

$$\log k_N = 0.0255T - 0.492 \tag{1·43}$$

式中：T——水温（℃）。

五　硫化物的反应

当河水中没有溶解氧和硝酸根离子而水温又高时，生成硫化氢和其它恶臭物质。因为含硫蛋白质在厌气状态下，可被大肠杆菌分解，生成的半胱氨酸被还原，生成有臭味的硫化氢，其反应式为

$$\begin{array}{l} CH_2CH(NH_2)\cdot COOH \\ \quad | \\ \quad S \\ \quad | \\ \quad S \\ \quad | \\ CH_2CH(NH_2)\cdot COOH \end{array} + 5H_2 \longrightarrow 2H_2S + 2NH_3 + 2CH_3\cdot CH_2COOH \qquad (1\cdot 44)$$

这反应在夏季污染的河流中最容易发生。硫化物反应的动态平衡可用图1-7表示。

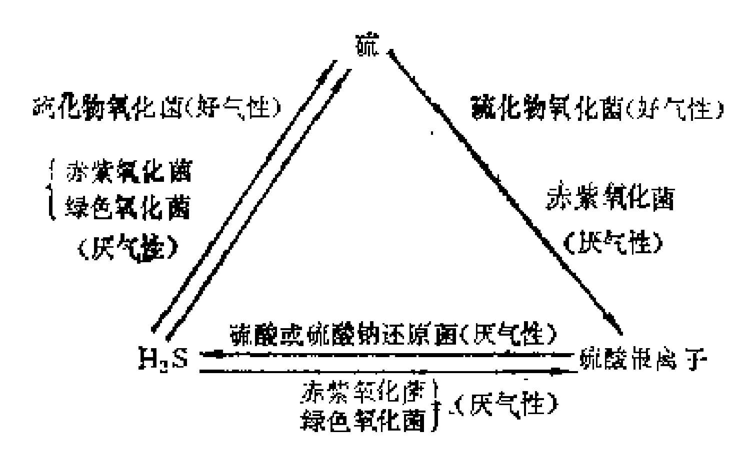


图1-7　硫化物反应循环

硫化氢产生的基本条件是要有硫的成分。而在潮汐河口区，海水中恰恰含有大量的硫酸根离子，这就造成了生成硫化氢的可能性。

（一）硫化物的还原

1.河水中的硫化物还原过程

威特兰曾对河水中溶解氧对硫化氢的生成进行过影响试验，说明当溶解氧低于0.16mg/l时才会生成硫化氢。

在缺氧条件下，硫酸根离子将发生以下反应

$$SO_4^{2-} + 有机物 \xrightarrow[(厌气性)]{硫酸还原菌} S^{2-} + H_2O + CO_2 \tag{1·45}$$

$$S^{2-} + 2H^+ \longrightarrow H_2S \tag{1·46}$$

因此硫化氢在溶液中的电离平衡在此有重要意义。在25℃的溶液中，硫化氢分两步电离

第一步反应 $H_2S \rightleftharpoons H^+ + HS^-$ (1·47)

其电离平衡常数

$$K_{H_2S} = \frac{[H^+][HS^-]}{[H_2S]} = 1.15 \times 10^{-7} \tag{1·48}$$

第二步反应

$$HS^- \rightleftharpoons H^+ + S^{2-} \tag{1·49}$$

其电离平衡常数

$$K_{HS} = \frac{[H^+][S^{2-}]}{[HS^-]} = 1.2 \times 10^{-13} \tag{1·50}$$

则未离解的硫化氢浓度与硫离子浓度的关系为

$$[H_2S] = \frac{[H^+]^2[S^{2-}]}{K_{H_2S} \cdot K_{HS^-}} = \frac{[H^+]^2[S^{2-}]}{1.38 \times 10^{-20}} = 0.725 \cdot 10^{(20-2pH)} \cdot [S^{2-}] \tag{1·51}$$

在一定温度时，硫化氢在水溶液和空气中有一定的分配比例。在25℃的蒸馏水中，其分配常数为

$$k = \frac{蒸汽中H_2S的浓度}{溶液中H_2S的浓度} = 0.406 \tag{1·52}$$

在25℃的0.5mol/l食盐溶液中，分配常数则为

$$k = 0.43 \tag{1·53}$$

硫化氢存在的状态与溶液的pH值有密切关系。当河水pH值大于8时，大多数H_2S离解为HS^-和S^{2-}离子而存在于水中，当河水的pH值小于8时，则大多数H_2S以未离解状态存在于水中，并向空气中扩散，产生臭味。硫化氢和pH值的关系可见图1-8所示。

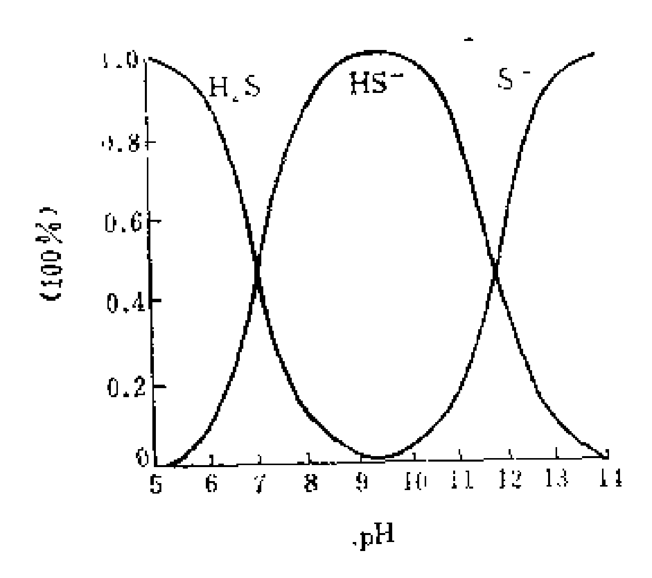


图1-8 硫化氢和pH值的关系曲线
(10^{-3}mol/l食盐溶液,25℃)

2. 潮汐河口区底泥中硫化物的还原

据英国泰晤士河河口区的试验，说明不论河水中的溶解氧有多少，底泥表层以下2cm深处的污泥都呈厌气状态。由河口水中进入底泥中的硫酸，在底泥层中发生厌气分解，生成的硫化氢量与底泥中的有机物量有关。据日本村上的研究有以下经验关系

$$[S]=0.2\,[BOD]^{0.773} \qquad (1\cdot54)$$

式中：［S］——硫化物的生成量（以S计）。mg (S)/(150d·g干泥)；

［BOD］——底泥的BOD，mg (O_2) /g（干泥）。

威特兰用泰晤士河河口底泥进行了温度对生成硫化氢影响的试验（见表1-3）。当温度在5—34℃之间时，每增加1℃，硫化氢发生量约增加7.5%。

3. 铁离子对硫化氢生成的影响

如果水中存在铁和亚铁离子，由于它们可以和S^{2-}生成难溶的硫化亚铁，而影响硫化氢的生成。

当水中无硫化氢和pH>7.8时，铁离子直接水解为氢氧化铁

$$Fe^{3+}+3OH^- \rightleftharpoons Fe(OH)_3\ (固) \qquad (1\cdot55)$$

氢氧化铁是一种难溶化合物，铁离子浓度可按溶液的pH而定

表1-3　河床污泥、污水和海水的混合液在不同温度时培养所生成的H_2S量

培养时间 (d)	21小时内收集的硫化氢 g (S)					
	5℃	10℃	15℃	20℃	25℃	36℃
5					痕	6.2
6				痕	1.9	2.7
8				2.1	2.2	4.7
10				1.3	1.6	1.9
13			痕	1.7	1.0	3.5
17		痕	—	—	—	—
21		—	1.6	—	1.6	3.0
22		0.6	1.2	—	1.8	2.9
23		0.5	1.0	—	1.2	3.3
24		0.2	0.8	1.8	1.8	4.8
27		1.0	3.0	4.9	3.0	5.2
28		0.4	0.9	3.4	4.4	5.1
29		1.5	3.9	6.7	2.8	6.7
30	8.93*	1.6	2.7	4.8	3.6	4.2
34	—	0.7	3.2	4.8	2.9	2.3
平均	—	0.8	2.0	3.5	2.4	4.0

〔注〕*——指培养期间内的总量

$$[Fe^{3+}] = \frac{K_{SP}}{[OH^-]^3} \qquad (1\cdot56)$$

式中：K_{sp}——氢氧化铁的溶度积，（4×10^{-38}，25℃）。

三价铁离子可还原成二价铁离子

$$Fe^{3+} + e^- \longrightarrow Fe^{2+} \qquad (1\cdot57)$$

亚铁离子的浓度可以根据铁离子浓度和其氧化还原电位E_h来计算

$$E_h = 771 - 57.8\log\left(\frac{[Fe^{2+}]}{[Fe^{3+}]}\right)\ mV \qquad (1\cdot58)$$

表1-4表达了〔Fe^{2+}〕、pH与E_h这三者之间的关系（18℃时）。由表可知，当pH＝7.5时，对应$E_h=0$的〔Fe^{2+}〕为8.5×10^{-6}mol/l（0.47mg/l）。

表1-4　18℃水中，与[Fe^{3+}]平衡的[Fe^{2+}]随pH和E_h的变化

E_h (mv)	pH						
	5.0	6.0	6.5	7.0	7.5	8.0	9.0
	亚铁离子浓度(mol/l)						
−269					3.9×10^{-1}	1.2×10^{-2}	1.2×10^{-5}
−154			3.9	1.2×10^{-1}	3.9×10^{-3}	1.2×10^{-4}	1.2×10^{-7}
−38		1.2	3.9×10^{-2}	1.2×10^{-3}	3.9×10^{-5}	1.2×10^{-6}	1.2×10^{-9}
+77	1.2×10	1.2×10^{-2}	3.9×10^{-4}	1.2×10^{-5}	3.9×10^{-7}	1.2×10^{-8}	
+193	1.2×10^{-1}	1.2×10^{-4}	3.9×10^{-6}	1.2×10^{-7}			
+309	1.2×10^{-3}	1.2×10^{-6}	3.9×10^{-8}				
+424	1.2×10^{-5}	1.2×10^{-8}					
+540	1.2×10^{-7}						
+655	1.2×10^{-9}						
+771	1.2×10^{-11}						

在含有硫化氢及亚铁离子的溶液中，硫离子与亚铁离子反应生成难溶的硫化亚铁沉淀

$$Fe^{2+} + S^{2-} \rightleftharpoons FeS\ (固) \tag{1.59}$$

$$[Fe^{2+}][S^{2-}] = K_{sp} = 4 \times 10^{-19}\ (25℃) \tag{1.60}$$

硫离子的浓度可由$[Fe^{2+}]$和溶度积K_{sp}求得

$$[S^{2-}] = \frac{K_{sp}}{[Fe^{2+}]} \tag{1.61}$$

根据给定的pH值和亚铁离子溶度，可由水中未电离的硫化氢和空气中的硫化氢关系式（1.51）、（1.53），推算出河口区水面空气中硫化氢的浓度。当pH = 7.5，$E_h = 0$，$[Fe^{2+}] = 0.47$ mg/l时，空气中将含有0.42mg/l的硫化氢。表1-5列出了在0.5 mol/l食盐溶液、pH = 7.5时，不同$[Fe^{2+}]$下计算得到的$[S^{2-}]$，溶液中的$[H_2S]$、空气中的$[H_2S]$的浓度值。

表1-5　与硫化亚铁和亚铁离子相平衡的硫化氢浓度(0.5mol/l食盐液溶)

$[Fe^{2+}]$ mol/l	$[S^{2-}]$ mol/l	$[H_2S]$(溶液中) mol/l	$[H_2S]$(空气中) mg/l	$[Fe^{2+}]$ mg/l
10^{-4}	4×10^{-15}	2.9×10^{-10}	0.0028	5.6
10^{-5}	4×10^{-14}	2.9×10^{-9}	0.028	0.56
10^{-6}	4×10^{-13}	2.9×10^{-8}	0.28	0.056
10^{-7}	4×10^{-12}	2.9×10^{-7}	2.8	0.0056
10^{-8}	4×10^{-11}	2.9×10^{-6}	28	0.00056
10^{-9}	4×10^{-10}	2.9×10^{-5}	280	0.000056

〔注〕空气中$[H_2S]$(mg/l) = $9.64\times10^{6}\times$(溶液中$[H_2S]$)

泰晤士河曾用上述计算方法计算，与实测值十分接近，硫化氢在空气中的发臭极限浓度为0.025mg/l，因此亚铁离子浓度达10^{-6}mol/l以上时，才不致发生臭气。

（二）硫化物的氧化

在有溶解氧的条件下（一般河水中溶解氧达0.16mg/l以上

时)硫化物被氧化。实验说明,含食盐量高的溶液,硫化物的氧化速度相对增高;当pH值在6.5—7.5时,硫化物的氧化速度也增高。

第三节 水体的耗氧与复氧过程

废水进入水体后,随着污染物在水体中的迁移过程,由于以下的几种原因,使河水中的溶解氧被消耗掉

1)河水中含碳化合物被氧化而引起耗氧。

2)河水中含氮化合物被氧化而引起耗氧。

3)河床底泥中的有机物在缺氧条件下,发生厌气分解,产生有机酸和甲烷、二氧化碳和氨等还原性气体,当这些物质释放到水体中时,消耗水中的氧。

4)晚间光合作用停止时,由于水生植物(如藻类)的呼吸作用而耗氧。

5)废水中其它还原性物质引起水体的耗氧。

河水溶解氧供应的来源有:

1)上游河水或有潮汐河段海水所带来的溶解氧。

2)排入河中的废水所带来的溶解氧。

3)河水流动时,由大气中的氧向水中扩散、溶解。

4)水体中繁殖的光合自养型水生植物(如藻类),白天通过光合作用放出氧气,溶于水中,据美国坎普(Camp)等人的报告指出,生物补给的氧量在很多情况下是相当大的。日本杉木昭典等人则认为从偏于保守考虑,一般不予计算。

各种污染物及氧源对水中溶解氧的影响,见图1-9和图1-10。

一 流水中有机物的耗氧

(一)CBOD的耗氧量

由于 $y_c = L_0 - L$

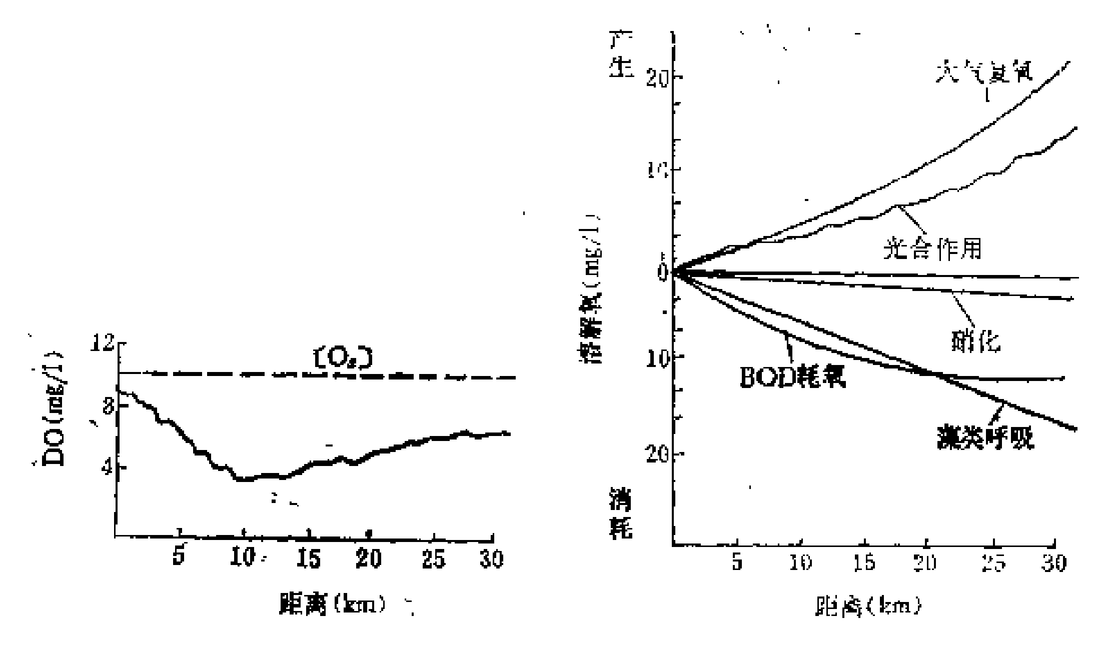
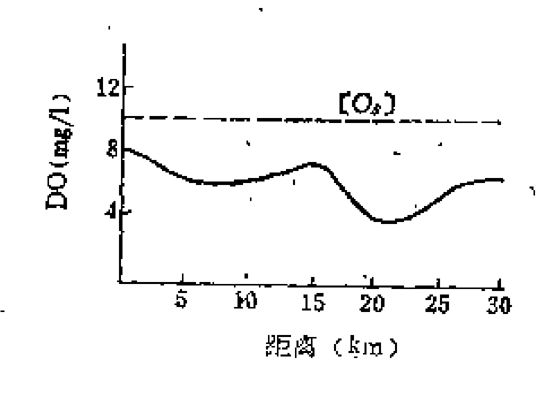


图1-9 各污染物对DO的影响



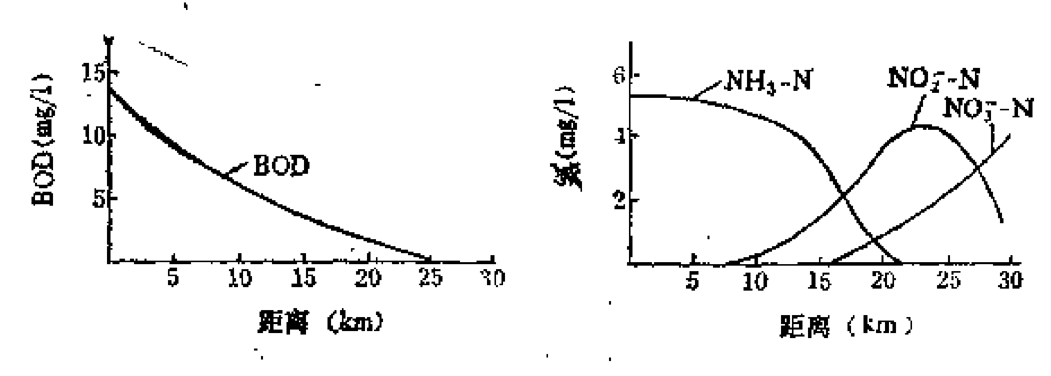


图1-10 BOD作用与DO的影响

$$L = L_0(e^{-k_1 t}) \quad (1 \cdot 62)$$

所以 $y_c = L_0(1 - e^{-k_1 t})$

式中： y_c——t时CBOD消耗的氧量，〔ML^{-3}〕；

L_0——t = 0 时的$CBOD_5$浓度，〔ML^{-3}〕；

L——t = t时的$CBOD_5$浓度，〔ML^{-3}〕；

k_1——CBOD的衰减速率系数，〔T^{-1}〕。

（二）NBOD的耗氧量

$$y_N = L_{N(0)}(1 - e^{-k_N t}) \quad (1 \cdot 63)$$

式中： y_N——t时NBOD消耗的氧量，〔ML^{-3}〕；

$L_{N(0)}$——t = 0 时的$NBOD_5$浓度，〔ML^{-3}〕；

k_N——NBOD的衰减速率系数，〔T^{-1}〕。

也可写成：

$$NBOD = 4.57[NH_3\text{-}N]_{ox} + 1.14[NO_2^-\text{-}N]_{ox} \quad (1 \cdot 64)$$

式中： NBOD——氮化物的总耗氧量，〔ML^{-3}〕；

$[NH_3^+\text{-}N]_{ox}$——被氧化的氨氮浓度，〔ML^{-3}〕；

$[NO_2^-\text{-}N]_{ox}$——被氧化的亚硝酸盐氮的浓度，〔ML^{-3}〕。

（三）氨氮转化为亚硝酸盐氮的耗氧量

$$y_{N1} = L_{N(0)}(1 - e^{-k_{N1} t_1}) \quad (1 \cdot 65)$$

式中： y_{N1}——t_1时氨氮转化为亚硝酸盐氮的耗氧量，〔ML^{-3}〕；

$L_{N1(0)}$——t = 0 时氨氮的浓度，〔ML^{-3}〕；

k_{N1}——$NH_3\text{-}N \longrightarrow NO_2^-\text{-}N$的反应速率系数，〔$T^{-1}$〕。

（四）亚硝酸盐氮转化为硝酸盐氮的耗氧量

$$y_{N2} = L_{N2(0)}(1 - e^{-k_{N2} t_2}) \quad (1 \cdot 66)$$

式中：

y_{N2}——t_2时亚硝酸盐氮转化为硝酸盐氮的耗氧量，〔ML^{-3}〕；

$L_{N2(0)}$——t = 0 时亚硝酸盐氮的浓度，〔ML^{-3}〕；

k_{N2}——由亚硝酸盐氮转化为硝酸盐氮的反应速率系数，〔T^{-1}〕。

（五）流水中BOD的总耗氧量

$$y=L_0(1-e^{-k_1 t})+L_{N(0)}[1-e^{-k_N(t-a)}] \quad (1\cdot67)$$

式中： L_0——$t=0$ 时$CBOD_5$浓度，$[ML^{-3}]$；

$L_{N(0)}$——$t=0$ 时$NBOD_5$浓度，$[ML^{-3}]$；

a——氮化合物硝化比碳化合物氧化的滞后时间，[T]。

也可写成：

$$y=L_1(1-e^{-k_1 t})+L_{N1}(0)[1-e^{-k_{N1}(t-a_1)}]$$
$$+L_{N2}(0)[1-e^{-k_{N2}(t-a_2)}] \quad (1\cdot68)$$

式中： $L(0), L_{N1}(0), L_{N2}(0)$——$t=0$ 时 CBOD，氨氮和亚硝酸盐氮的浓度，$[ML^{-3}]$；

k_1, k_{N1}, k_{N2}——CBOD、氨氮和亚硝酸盐氮的氧化分解速率系数，$[T^{-1}]$；

a_1、a_2——氨氮和亚硝酸盐氮的氧化比 CBOD的氧化滞后的时间。

（六）水生植物呼吸所消耗河水溶解氧的速率

$$\frac{dO}{dt}=-R \quad (1\cdot69)$$

式中： R——水生植物呼吸所消耗河水溶解氧的速率系数，$[ML^{-3}T^{-1}]$。

二 河床底泥的耗氧

河床底泥的耗氧问题，对已污染的河流中的溶解氧影响很大。因此许多国家早就进行研究。麻省理工学院和加利福尼亚大学进行了关于河水中浮游物与河床污泥间的交换作用的研究。从河流工程学的角度进行了关于泥沙运动规律方面的研究，作出相当准确的平衡河床的设计方法。

（一）河床物质的化学性质

河床物质的化学性质是随河流的特性、不同的时间和地点而变化的。这些因素有：1）悬浮物的数量和性质，2）水文条件，3）有机物分解速率的变化，4）是否疏浚等。

表1-6汇集了弗尔（Fair）、南部、艾瑟斯（Isace）、阿伦（Allen）和杉木昭典等人对一些河流底泥所分析的资料。从这些资料可见底泥的化学成分随地点和时间的变化是很大的。例如，日本偶田川1964年初其底泥烧灼减量都在10％以下（相对比其它河流低），而1964年下半年，因废水经过治理，底泥组份发生变化，无机物成分增高，烧灼减量接近30％。

（二）河床底泥的耗氧

河水中的溶解氧在底泥中不会浸透太深，而且即使浸透也会因有机物的分解很快就被消耗掉，因此只在底泥表层的最上部保持好气性分解。更深的部位进行厌气性分解。有机物的分解按图1-11进行；分解后的产物有有机酸、甲烷、二氧化碳和氨。有机酸会逐渐扩散到上层，甲烷、氨等还原性气体及 CO_2 也向上层迁移或释放到水体中，被表层底泥或水体中的溶解氧氧化。弗尔指出：底泥耗氧与氧的扩散速度无关。因此，10cm以下的底泥中分解物不会上升到表层的好气性部位。影响分解速度的因素有：1）能被分解的有机物的数量，2）有机物分解的难易程度，3）底泥的密度等。弗尔指出：河床底泥有机物的分解速度与可分解物的数量成正比，易被微生物降解的物质很快被分解，难降解的则被残留下来。总的来说，底泥使河水增加的耗氧BOD速度可用下式表达：

$$\frac{dL}{dt}=La \tag{1-70}$$

式中：La——河底沉泥厌气分解所引起河水的BOD增加速度，$[ML^{-3}T^{-1}]$。

日本偶田川两个断面上取底泥样，测得河床单位面积上，10天的平均耗氧速度为0.0272和0.038g $(O_2)/(m^2\cdot h)$，泰晤士河底

表1-6 河床污泥分析实例

采样地点	年、月	含水率 (%)	平均干燥重量					总硫化物
			烧灼减量 (%)	有机碳 (%)	总氮 (%)	碳氮比	硫化物 %	
美国河床污泥		51		1.92	0.214	9.0	0.16	
南旧金山湾				1.13			0.03	
第巴顿—卡拉维尔斯(Dimbarton—Calaveras)				1.20			0.037	
卡拉维尔斯—阿尔维苏(Calaveras—Alviso)				1.43			0.041	
阿尔维苏—凯奥蒂河(Alviso—Coyote Creek)				1.54			0.094	
康涅狄格(Connecticut)		45.97	2.5—14					
家庭污水污泥		91.5	83					
污水污泥		88.8	13.9		3.75			
新英格兰(New England)河床污泥		82.6	24.2		0.62			
英国安克尔(Anker)河污泥		76.3	15.3		4.4			
阿冯(Avon)		75—83	11.7—17		4.1—5.1			
S.德尔法(S.Delph)		46.7	11		1.3			
运河(Canal)		60.3	11.2		2.4			
奥尔德(Alde)有潮河,牛津	1952. 1			1.29	0.13	10.2		
奥尔德(Alde)有潮河, 牛津				1.59	0.13	11.9	0.05*	

〔注〕*为H_2S

续表

采样地点	年、月	含水率 (%)	平均干燥重量					总硫化物
			烧灼减量 (%)	有机碳 (%)	总氮 (%)	碳氮比	硫化物 (%)	
德贝(Deben)有潮河,波顿塞Bawdsey	1951, 10			1.01	0.11	9.6		
德贝(Deben)有潮河，波顿塞Bawdsey				1.16	0.08	14.7	0.05*	
克鲁奇(Crouch)有潮河，布里奇玛斯(Bridgmarsh)	1951, 11			1.49	0.11	14.1	0.19*	
拜特莱斯布里奇(Baitlesbridge)有潮河				2.37	0.23	10.4	0.15*	
默西河(Mersey)有潮河段上游		71.6	21.4	4.34	0.53	46.5	0.18	
蒂尔伯里(Tilbury)	1951, 11							
日本大板市河，天满桥	1956, 4		2.27		0.18		0.003	
大江桥					0.19		0.001	
玉江桥					0.11		0.17	
川口町			5.44		0.51		0.19	
西九条渡			18.1		0.39		0.61	
三于日渡			16.4		0.53		0.75	
松岛渡			17.7		0.33		0.58	
日本偶田川	1964 1		15.5					
志茂桥		31.5	34.9	2.55				
新田桥		65.2	11.7	5.71				
吾向桥		54.9	8.6	4.41				

续表

采样地点	年.月	含水率 (%)	平均干燥重量					总硫化物
			烧灼减量 (%)	有机碳 (%)	总氮 (%)	碳氮比	硫化物 %	
志茂桥(距河口25km)	1965.2	29.3	2.54				0.152	23.8
	6	29.8	4.01				0.108	3.4
	8	26.1	2.13				0.076	4.0
	9	27.1	2.15			0.031	0.032	3.1
新田桥(距河口22km)	1965.2	43.6	6.33				0.821	16.5
	6	37.8	4.30				0.038	9.8
	8	21.2	3.06				0.033	9.9
	9	33.3	3.04		0.0217		0.025	19.2
小台桥(距河口18km)	1965.8	22.9	2.22				0.037	12.9
	9	28.3	4.82		0.0197		0.038	1.1
宫向桥(距河口8.5km)	1965.2	26.4	2.42				0.233	13.5
	6	40.0	5.86				0.039	24.5
	8	40.0	5.86				0.108	27.1
	9	42.3	5.73		0.0254		0.086	26.6
两国桥(距河口6km)	1965.2	32.6	3.78				0.186	11.8
	6	50.0	9.06				0.117	17.9
	8	48.5	6.78				0.125	21.7
	9	8.15	8.39		0.05		0.086	31.5

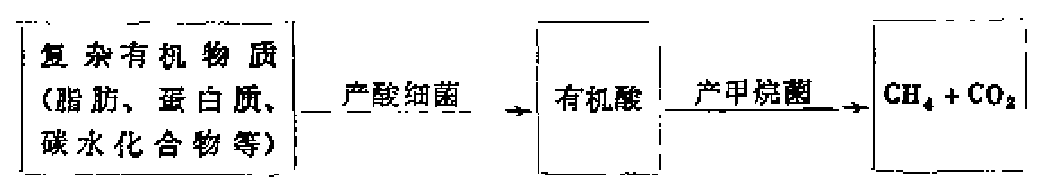


图1-11　有机物的厌气分解作用

泥测得为0.04g $(O_2)/(m^2\cdot h)$。设河流平均水深为2 m，则偶田川底泥的耗氧量为0.326和0.456mg/(l·d)，泰晤士河底泥的耗氧量为0.48mg/(l·d)。这些数值说明河床有机物的耗氧量只占河流总耗氧量的1%左右，由此可见，一般情况下底泥对河水溶解氧平衡的影响很小，对中等程度或严重污染的河流其影响才明显。表1-7列出了污泥耗氧量的参考数据。

美国密执安大学维尔斯（Velz）在预测迈阿密（Miami）河

表1-7　污泥的耗氧量

	试验方法			耗氧量 [$g(O_2)/(m^2\cdot d)$]	试验者
室内试验	底泥深度	0.5cm		1.84	贝蒂(Baity)(1938)
		1.0		2.89	弗尔等　(1941)
		1.5		3.45	
		2.0		3.77	
		4.0		5.13	
	温德梅(Windermere)未搅动污泥			0.2	麦克瑞瑟(Mackereth)(1962)
	泰晤士河污泥	1d	7℃	0.49	水质污染研究所(1953)
			15℃	0.63	
			25℃	1.22	
		5d	7℃	0.20	
			15℃	0.39	
			25℃	1.02	
现场试验	温德梅污泥			0.05	麦克瑞瑟(1962)
	泰晤士河污泥	30min	16.5℃	0.88	水质污染研究所 (1953, 1961)
			19℃	0.98	
			20℃	0.88	
	兹泥(Zvel)			2—5	

溶解氧时，采用了以下的方法估算河床污泥的需氧量。先绘制河道各种流量下的流速变化图，从该图选出小于0.18m/s的地点，作为发生底泥堆积的地点，堆积于河床的污泥所消耗水中溶解氧随下式而变

$$L_d = \frac{P_d}{2.3k'}(1-10^{-k't}) \quad (1\cdot71)$$

式中：L_d——底泥耗氧量；

P_d——每日积累的BOD；

k'——脱氧系数。

（三）河床底泥再上浮的耗氧

河床底泥因水流状况的变化（如枯水时水库泄水、有潮河段潮汐变化等）在河流中重新上浮，这时上浮底泥的耗氧量比堆积底泥大得多。表1-8列出再悬浮的浮泥需氧量的参考数据，数值比表1-7所列的静置污泥的耗氧量〔1.84—5.13g(O_2)/(kg·d)〕要大得多。杉木昭典在1965年采集偶田川三个断面处的底泥，用搅拌器搅拌，同时测定BOD，测得新田桥、言向桥、两国桥底泥的BOD_5分别为125、57和70g(O_2)/(kg·d)，都相当大。

据维尔斯的实际测定，确认当河水平均流速在0.18m/s以下时，污泥发生堆积；当河水流速超过0.3—0.45m/s时引起底泥的冲刷。此数值与泰晤士河有潮河段的实测值基本一致。帕特纳尔德斯（Partheniades）对含水率高的污泥河床和低速直接沉淀污泥的河床进行了实验，得出引起冲刷的最低流速分别为0.2和0.23m/s。

三 再曝气复氧作用

大气中的氧溶解于河水中的现象，被称为再曝气（reaeration）作用。它是河流中溶解氧的主要来源。据英国水质污染研究所对泰晤士河的估算

表1-8　再悬浮污泥的耗氧量

采泥地点		固态物质	烧灼减量 (%)	耗氧量	
				(d)	g(O_2)/kg (挥发固体)
康涅狄格河污泥	1	22.3	3.53	4	46.7
				6	57.8
				10	81.7
	2	40.9	2.50	4	56.4
				6	75.2
				10	123.5
	3	11.3	14.4	4	84.2
				6	115.8
				10	179.7
	4	2.6	11.7	4	93.9
				6	131.8
				10	198.2
	5	7.3	6.1	4	62.5
				6	68.0
				10	90.8
	6	41.3	6.73	4	24.1
				6	31.5
				10	44.2
	7	41.6	6.08	4	28.1
				6	35.2
				10	49.0
	8	54.7	2.97	4	34.7
				6	42.8
				10	57.3
	9	22.0	9.68	4	80.9
				6	116.8
				10	155.5
	10	33.7	4.33	4	30.0
				6	39.4
				10	53.2
新英格兰河污泥		17.4	24.2	5	47.7
(英)安克尔河污泥		23.7	15.3	5	32.5

续表

采泥地点	固态物质	烧灼减量 (%)	耗氧量 (d)	$g(O_2)/kg$ (挥发固体)
阿冯	24.6	11.7	5	16.1
	16.6	17.1	5	86.7
	22.2	12.8	5	110.2
齐尔谋(Chelmer)	53.3	11.0	5	36.4*
泰晤士	43.1		5	6.2*
	33.5		5	8.7*
	26.5		5	9.5*
	18.0		5	15.6*
	24.0		5	8.1*

〔*为$g(O_2)/kg$(干固体)〕

河水的总需氧量 979 t/d

其中 大气向河水的供氧量 792 t/d

上游河水供氧量 84 t/d

海水的供氧量 7 t/d

氮及硫化物中的氧量 96 t/d

可见由大气向河水的供氧量占主要地位。

（一）过去对再曝气理论的研究

1.分子扩散理论

再曝气现象可以看作是一种液相和气相之间的扩散现象。它的基本表达式可以用费克（Fick）公式表达

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -D_M \frac{\partial O}{\partial x} \tag{1·72}$$

式中：$\frac{\partial m}{\partial t}$——氧分子扩散通量，〔$ML^{-2}T^{-1}$〕；

D_M——氧的分子扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

$\frac{\partial O}{\partial x}$——$x$方向的氧浓度梯度，〔$ML^{-4}$〕；

O——河水中氧的浓度，〔ML^{-3}〕。

水流方向氧浓度随时间的变化率为

$$\frac{\partial O}{\partial t} = -\frac{\partial m}{\partial t\ \partial x} = D_M \frac{\partial^2 O}{\partial x^2} \tag{1·73}$$

布莱克（Black）和费尔普斯（Phelps）用傅里叶级数求解得

$$D_t = D_0 \cdot 0.811 \left(e^{-k} + \frac{e^{-9k}}{9} - \frac{e^{-25k}}{25} + \cdots \right) \tag{1·74}$$

$$D_t = O_s - O \tag{1·75}$$

$$D_0 = O_s - O_0 \tag{1·76}$$

$$k = \frac{\pi^2 D_M t}{4h^2} \tag{1·77}$$

式中：D_t、D_0——$t=t$ 和 $t=0$ 时；河水的溶解氧亏量（又称"亏氧量"或溶解氧的亏缺数）；〔ML^{-3}〕；

O_s、O、O_0——河水中饱和的、实际的和初始的溶解氧量，〔ML^{-3}〕；

h——平均水深，〔L〕；

t——河水流动时间，〔T〕。

斯特里特（Streeter），赖特（Wright），凯尔（Kehr）等在应用上式研究中，发现流速小时结果很好，而流速大时，计算值与实测值之差就变大。这是由于上式只考虑分子扩散的结果。

2.再曝气的基本公式

引用亨利（Henry）定律表达再曝气量的变化

$$R = \frac{dO}{dt} = -\frac{dD}{dt} \tag{1·78}$$

再曝气速率

$$\frac{dO}{dt} = -k_2 D \tag{1·79}$$

$$D = O_s - O \tag{1·80}$$

式中：　O——河水 t 时的溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

D——河水 t 时的溶解氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

O_s——在温度T℃时河水溶解氧的饱和浓度，〔ML^{-3}〕；

k_2——再曝气系数，〔T^{-1}〕。

河水溶解氧的饱和浓度与水温的关系为：

$$O_s = \frac{4.68}{316 + T} \quad (1·81)$$

式中：T——水温，（T）。

方程（1·79）、（1·80）、（1·81）是目前表示再曝气过程的基本关系式。

3.双膜理论（two film theory）

双膜理论是惠特曼-刘易斯（Whitman-Lewis）于1924年提出的。他们认为在气相和液相之间的界面上，存在气体和液体两层薄膜，通过该薄膜的气体进行分子扩散。其双膜层扩散模式见图1-12。

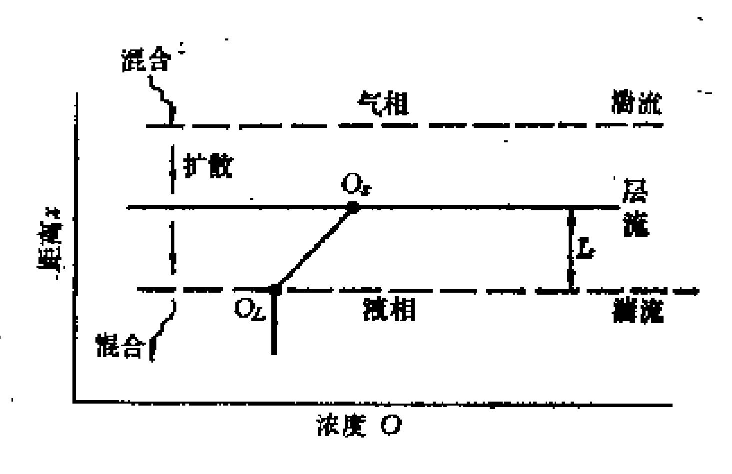


图1-12　双膜理论的扩散模式

双膜理论是假设通过液膜的氧分子，瞬间便可进入液体中，并假定液膜内氧分子扩散速率在浓度梯度一定时是稳定的。

氧分子的迁移系数可用下式表示：

$$k_L = D_M / L \quad (1·82)$$

式中：D_M——氧分子在水中的扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

L——液膜厚度，〔L〕；

K_L——氧分子的迁移系数，〔LT^{-1}〕。

在整个液相中溶解的气体的浓度变化为

$$\frac{dO_L}{dt}=k_L\frac{A}{V}(O_S-O_L) \tag{1·83}$$

式中：A——界面面积，〔L^2〕；

V——液体的体积，〔L^3〕；

O_s——界面氧浓度（饱和浓度），〔ML^{-3}〕；

O_L——液相中溶解氧的浓度，〔ML^{-3}〕。

积分式（1.83）得

$$\log\frac{O_s-O_0}{O_s-O_L}=k_L\frac{A}{L}t \tag{1·84}$$

式中：O_0——液相的初始浓度，〔ML^{-3}〕。

双膜理论只在很有限的场合下与实测值一致。双膜理论在理论上是否存在，分子扩散速率是否稳定等方面，存在的一些问题，还在继续研究中。

4. 渗透理论（penetration theory）

1） 希格比（Higbie）于1935年提出了渗透理论（或称液膜更新理论）。希格比的学说，认为双膜理论只适用于膜的接触时间比分子扩散时间还长的场合，其它场合应考虑非稳定的分子扩散。他假设接触界面的更新时间为t'，〔T〕。单位时间的更新率为γ。

在初始条件和边界条件为

$O=O_L$时，$t=0$，$x>0$；$O=O_s$时，$t>0$，$x=0$；$O=O_L$时，$t>0$，$x=\infty$

解方程（1·73）得到氧分子的迁移系数为

$$k_L=1.13\sqrt{D_M\gamma} \tag{1·85}$$

式中： k_L——氧分子迁移系数，〔LT^{-1}〕；

γ——单位时间气液接触面的更新率，〔T^{-1}〕，

$\gamma = 1/t'$；

t'——接触界面的更新时间，〔T〕。

希格比的理论，可用于以下这种过程：整个液体静止到时间t'，马上就被混合，然后又静止t'时间，接着又被混合，这样一种重复过程。

从$t=0$到$t=t'$的平均输氧量为

$$N = 1.13\sqrt{D_M\gamma}\,(O_S - O_L) \tag{1·86}$$

2）丹克沃茨（Danckwerts）认为被搅动的河流的自由表面并不存在膜的停滞状态，液膜中不存在层流条件，对于气相来说，接触膜经常更新，同时各种接触时间长短不同的膜，随湍流而进入液体内，气体也随之进入液体内。丹克沃茨假定这种膜的存在时间与更新次数之间没有关系，完全是无规则的，用以下形式表达t时膜存在的时间分布

$$f(t) = \gamma e^{-\gamma t} \tag{1·87}$$

式中： γ——单位时间内的接触面更新率，〔T^{-1}〕

$$\gamma = 1/t' \tag{1·88}$$

t'——接触面更新时间，〔T〕

在相同边界条件下，用上式求解方程（1·72），得到

$$N = (O_S - O_L)\sqrt{D_M\gamma} \tag{1·89}$$

$$\therefore\quad K_L = \sqrt{D_M\gamma} \tag{1·90}$$

式中： 符号同（1·85）、（1·86）式。

3）多宾斯（Dobbins）认为惠特曼-刘易斯设想的双膜具有统计意义。表面膜连续不断地进入水中，又不断更新出新的膜。他在相同的边界条件下解得

$$k_L = \sqrt{D_M\gamma}\,\coth\sqrt{\frac{\gamma L^2}{D_M}} \tag{1·91}$$

式中：　k_L——氧分子的迁移系数，〔LT^{-1}〕

L——液膜厚度，〔L〕；

γ——单位时间接触面更新率，〔T^{-1}〕；

当$\gamma \longrightarrow 0$时，$k_L = D_M/L$

当$\gamma \longrightarrow \infty$时，$k_L = \sqrt{D_M \gamma}$

前者表示双膜理论，后者表示表面更新理论。

（二）再曝气系数（或复氧系数）的经验公式

目前许多研究者着力于根据再曝气的基本公式

$$\frac{\mathrm{d}O}{\mathrm{d}t} = -k_2(O_S - O) \tag{1·92}$$

用实测数据来推导再曝气系数k_2的经验公式。使k_2与水文要素（如：水深、流速、能量梯度等）建立关系。得出了各种表达k_2的经验公式，这些经验公式应用时，必须注意其测定的范围和水流状况。

普遍的经验公式具有以下形式

$$k_2 = p\frac{u^m}{h^n} \quad (1/\mathrm{d})\text{ 或 }(1/\mathrm{h}) \tag{1·93}$$

式中：　k_2——再曝气系数，〔T^{-1}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

h——平均水深，〔L〕；

p、m、n——经验常数。

（三）奥康纳-多宾斯（O'Connor-Dobbins）再曝气系数关系式

奥康纳-多宾斯推导出的氧分子迁移系数基本关系式为

$$k_L = \sqrt{D_M \gamma} \cdot \coth\sqrt{\frac{\gamma L^2}{D_M}} \tag{1·94}$$

γ、L、D_M具有代表性的数值为$\gamma = 0.01s$，$L = 0.04cm$，$D_M = 2.036 \times 10^{-9} m^2/s$。当$L$略增大些时：

$$\coth\sqrt{\frac{\gamma L^2}{D_M}} \doteq 1.0$$

所以

$$k_L = \sqrt{D_M \gamma} \tag{1·95}$$

此算式与无双膜时的丹克沃茨公式(1.90)一致。

奥康纳-多宾斯引用普兰特的混合长度概念来表示表面交换率，用流速脉动增量的平均值$|\bar{u}|$表示湍流强度。从表面到混合长度l之间的水分子运动与表面更新有关，$|\bar{u}|$越大或l越小，表面更新速度越大，即表面交换时间为

$$t = \frac{l}{|\bar{u}|} = \frac{1}{\gamma} \tag{1·96}$$

式中： l ——液面到混合的长度，〔L〕；

$|\bar{u}|$——湍流流速脉动增量的平均值，〔LT^{-1}〕。

由密西西比河的实测结果，混合长度l和流速的偏差量各占水深及平均流速的10 %。因此

$$\gamma = \frac{|\bar{u}|}{l} = \frac{0.1u}{0.1h} = \frac{u}{h} \tag{1·97}$$

将（1.97）式代入（1.95）得

$$k_L = \sqrt{\frac{D_M u}{h}} \tag{1·98}$$

又 $k_2 = \frac{k_L}{h}$

所以 $$k_2 = \frac{(D_M u)^{0.5}}{h^{1.5}} \tag{1·99}$$

式中： k_2——再曝气系数，〔T^{-1}〕；

D_M——氧在水中的扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

h——平均水深，〔L〕。

由于奥康纳-多宾斯公式计算简便，目前常用它估算k_2值。

（四）日本村上的再曝气系数关系式

村上认为在表面交换率中应该考虑表面张力，由此推导得

$$k_2 = c' \frac{g^{3/8} \rho^{1/2} \nu^{3/8}}{\sigma^{1/2}} \frac{D_M^{1/2} n^{3/4}}{} \times \frac{u^{9/8}}{h^{3/2}} \quad (1 \cdot 100)$$

村上在宽30cm、长150m的水渠中进行实验推求c'，得以下再曝气系数关系式

$$k_2 = 3.21 \times 10^5 \frac{g^{3/8} \rho^{1/2} \nu^{3/8} D_M^{1/2} n^{3/4}}{\sigma^{1/2}} \times \frac{u^{9/8}}{h^{3/2}} \quad (1 \cdot 101)$$

式中： g——重力加速度，〔LT^{-2}〕；

ρ——液体比重，〔ML^{-3}〕；

ν——水流运动粘滞系数，〔L^2T^{-1}〕；

D_M——氧在水中扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

n——曼宁的粗糙系数；

σ——水的表面张力，〔ML^{-2}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

h_2——平均水深，〔L〕。

当水温为20℃时，$g = 9.8 m/s^2$，$\rho = 99.8 \times 10^3 kg/m^3$，$\nu = 1.0105 \times 10^{-6} m^2/s$，$D_M = 2.037 \times 10^{-9} m^2/s$，$\sigma = 7.275 \times 10^{-2} kg/s^2$代入（1.101）得：

$$k_2 = \frac{22.56 n^{3/4} u^{9/8}}{h^{3/2}} \quad (1 \cdot 102)$$

式中：k_2——20℃时再曝气系数，（d^{-1}）；

u——平均流速，（m/s）；

h——平均水深，（m）；

n——粗糙系数。

村上公式的计算值和河流实测值之间很一致。

四　藻类光合作用的增氧

河流中的水生植物可以利用二氧化碳、无机营养物和水借助

光能合成有机物，藻类所发生的这种光合作用在水生植物中占特别重要的地位。藻类在河流中与细菌具有如图所示的共栖和互利关系。藻类光合作用，以二氧化碳、水和氨作为碳源、氧源和氮

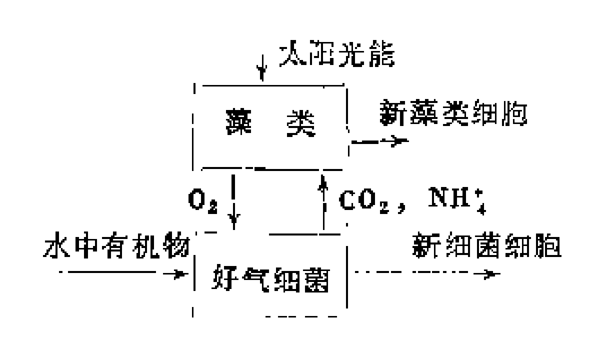


图1-13 藻菌共生关系

源，借助光能合成单细胞藻类有机体$C_{7.6}H_{8.1}O_{2.5}N$，其反应是如下的增氧过程

$$7.6CO_2+2.5H_2O+NH_3\xrightarrow{\text{光能}}C_{7.6}H_{8.1}O_{2.5}N+7.6O_2 \quad (1.103)$$

同时，水中的好气细菌利用溶解氧进行代谢，其过程又释放出CO_2和无机营养物（如NH_4^+），供藻类生长的需要。

据英国水质污染研究所用明暗瓶对照对俄亥俄河水所作的试验，得出了藻类光合作用的产氧量P为63.9kg/（d·ha），而藻类呼吸作用的需氧量R为50.5kg/(d·ha)，产氧量与需氧量之比$P:R$为1.3。对污水所做的试验，结果是光合作用的产氧量P为205kg/（d·ha），呼吸作用的需氧量R为146kg/（d·ha），其$P:R$为1.4。有人研究每公斤藻类约可产氧1.65kg。

藻类光合作用产氧的速率可用下式表达

$$\frac{dO}{dt}=p \quad (1\cdot104)$$

式中：p——产氧速率，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕。

光合作用的产氧速率随光照强度而变化。晚间光合作用将停止。所以产氧速率与最大产氧速率随时间的变化关系可表达为

$$
\begin{cases} p(t) = p_m \sin \dfrac{\pi(t - t_{sr})}{t_{ss} - t_{sr}} & t_{sr} < t < t_{ss} \\ p(t) = 0 & t_{sr} > t > t_{ss} \end{cases} \quad (1\text{-}105)
$$

式中： p_m——光合作用下最大产氧速率，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

t ——任意时间，〔T〕；

t_{sr}，t_{ss}——日出和日落的时间，〔T〕。

当日出时间为6点，日落时间为18点时可画得以下半正弦曲线（图1—14）。

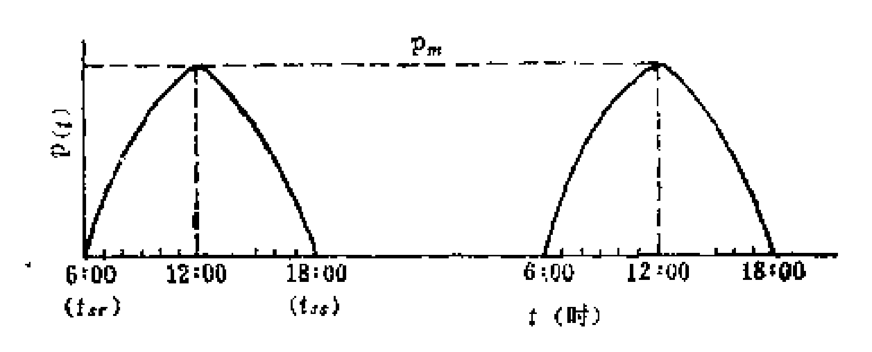


图1-14 光合作用产氧率变化曲线

第四节 水体的热现象

一 热现象

水温是水质因素中的一个重要变量，在确定其它水质指标（如氧的浓度或BOD等污染物浓度）的过程中往往与水温有关。水温的变化可对水质及水的利用产生较大的影响。水体中的鱼类与其它水生生物及取自河流的饮用水源对水环境的温度也非常敏感。

水温的变化与一系列热交换过程有关，对天然水面的热交换过程可区分为以下四种：

（一）同大气的能量交换

这包括短波太阳辐射、短波反射、长波大气辐射、大气辐射的反射、长波返回辐射、因蒸发或凝结产生的热损失或热增加、

因传导引起的热损失或热增加等。

短波太阳辐射：太阳能以短波辐射的形式通过地球大气层直接由太阳传到水面。太阳短波辐射是太阳辐射的一部分，这部分不被大气吸收，它主要是可见光。入射能量取决于大气条件（如云层厚度）和流域的山岳形态。入射的可见光部分被反射，其余部分转换为河水中的热。被水面反射的那部分太阳辐射能称为太阳辐射的反射。反射的部分取决于入射角，且一般小于入射的10%。

长波大气辐射：长波大气辐射由河流上面的大气辐射。由水珠和蒸气组成的大气吸收太阳能并把它再辐射到水面（温度辐射）。其强度取决于气温和湿度。从水面反射的长波辐射能量称为大气辐射的反射。约3%的长波大气辐射被反射了。

水的长波返回辐射：水的长波辐射只由很薄的表面层反射，由于对红外辐射来说水的吸收系数大，因此，表面温度是变化的，这种变化由河流辐射热损失决定的。

热传导：气温与水温间的差别，可通过热传导而发生能量交换。单纯的热传导，即通过分子或原子碰撞而交换热量，只对水气交界面起作用。

对流：水气两种介质的热输送主要通过对流，(包括大尺度的移流和涡流扩散的紊动混合两种形式的对流)。空气中的对流基本靠压力促成，因此风速对水面显热通量的变化影响较大，即使无风天气，河水流动也会引起因同空气的摩擦而紊动混合（或涡旋扩散）。在特殊情况下，如水温比气温高出很多时，浮力可以是对流的主要原因。河流内部的对流是河流流量的函数。

蒸发：当水和空气互相接触时，有些水分子具有足够的能量足以冲出水面，逸散到空气中成为水气。与此同时，空气中有些水分子穿进水面变成液相的一部分。蒸发则是液体中的水迁移到空气中去的净速率，它是微观的蒸发和凝结过程的总和。蒸发过程可用图1-15来表示。水面上未饱和的空气不断地被新的空气代

换，而空气的温度和湿度则保持恒定。假设水面温度开始时和空气温度相同，蒸发在开始时减少水的显热。此时，空气和水的温度差引起热能由空气向水中流动。当蒸发继续进行时，温度差变得越来越大，直至其梯度达到从空气中流入的热能等于通过蒸发从水中释放的热能，这个温度称为湿球温度。此后温度就保持不变。显然净蒸发热通量取决于空气中的水蒸气压力和水的表面薄层中相应温度下的饱和蒸汽压力这两者之间的梯度。在无强风时此种梯度主要引起自由对流；而在强风作用时将强化蒸发速率，引起强迫对流。在极端情况下，净蒸发量是负的，即河流表面发生水蒸气的凝结。一般由水蒸发所带走的热和下雨所增加的热可以忽略。

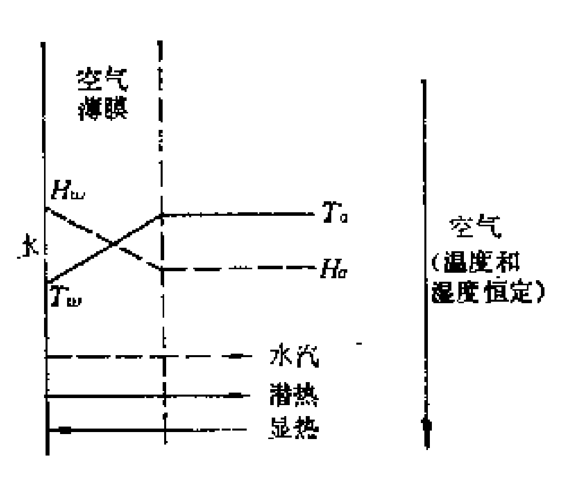


图1-15 自由水面的蒸发
T_a——气温， T_w——水温
H_a——空气能量， H_w——水能量

水面同大气的热交换可综合表示成图1-16。

（二） 同河床的能量交换

与河床的热交换是通过固体的热传导来确定的。因为它的温度梯度小、热交换量很小，一般忽略此影响。

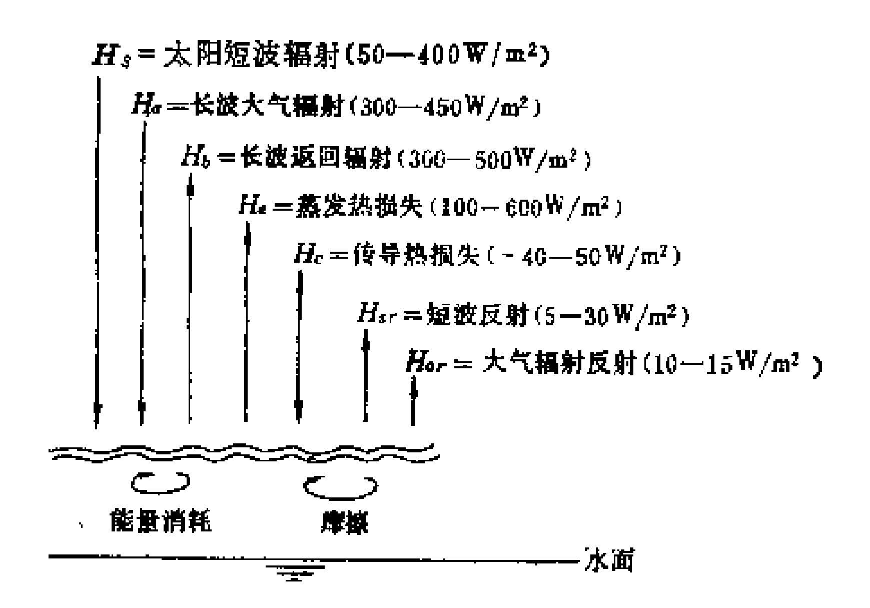
（三） 内部产生的热

河流中产生的内部热主要来自两种因素：一是水的势能转换成摩擦热；二是化学能经生化作用转换成热，即使在污染严重的河流中，这种转换热也只起较小的作用。

（四） 人为的加热与减热

人类活动的影响主要是废热的排放以及通过水电站利用水能产生的热，后者将使一部分能量转换为热，它常可忽略。

废热或余热排入河中增加的热交换通量一般是可观的。



$$\Delta H = \underbrace{(H_s - H_{sr} + H_a - H_{ar})}_{H_n} - \underbrace{(H_b \pm H_c \pm H_e)}$$

吸收的净辐射（与水面温度无关） （与温度有关项）

图1-16 水面热交换过程(括号内的数值是中等纬度地区的日平均典型值)

总结以上的热过程可见影响水面热量交换与河流水温的最重要因素是气象参数。气象参数可以决定水体的平衡温度，即对完全混合的水体在四周及底部绝热条件下，其表面净热通量为零（平衡状态）时的水温。

二 水面的热交换

通过水—气交界面上热交换的净热通量，是几种因素的总和

$$\Delta H = H_s + H_l - (H_e + H_c)$$
$$= (H_{si} - H_{sr}) + (H_a - H_{ar} - H_b) - (H_e + H_c) \quad (1 \cdot 106)$$

式中：

H_{si}——太阳短波的净辐射热通量；$H_{si} = H_s - H_{sr}$；

H_l——大气长波的净辐射热通量；$H_l = H_a - H_{ar} - H_b$

H_e——水面蒸发而失去的热通量；

H_c——从水到空气的对流热通量；

H_s——到水面的太阳短波辐射；

H_{sr}——太阳短波辐射的反射；

H_a——大气的长波辐射；

H_{ar}——太气长波辐射的反射；

H_b——水到大气的长波返回辐射。

（一）太阳短波的净辐射H_{si}

太阳短波辐射的波长范围在0.14μm到4.0μm之间。入射到地球水面上的太阳短波辐射强度是随地球纬度、高程、季节、一天中的时间和气象条件而变化的。通常可用直接日射强度计来测定太阳短波的辐射强度。表1－8列出了美国气象局对北半球不同纬度地区可见部分（4000—7000Å）太阳辐射能量值的观测值，（即H_s）。

由水面反射的短波能量H_{sr}可由反射系数γ_s来计算。反射系数是辐射的反射值与入射值之比，即

$$\gamma_s = H_{sr}/H_s \quad (1\cdot107)$$

因此，太阳短波对水面的净辐射能量H_{si}应为

$$H_{si} = H_s (1 - \gamma_s) \quad (1\cdot108)$$

式中： γ_s—水面的短波辐射的反射系数，太阳的反射率是太阳所在高度和云层覆盖量的函数，一般γ_s小于15%。

安德森（Anderson）（1954)年提出了一个常用的计算水面总反射率的方程

$$\gamma_s = A\alpha^B \quad (1\cdot109)$$

式中：

α——太阳的角度，°；

A，B——由云层确定的常数。

太阳角度可用佩蒂（Paity）等人（1974年）所提出的方程

表1-8 以纬度和月份为函数的可见太阳短波辐射能量值

纬度		月份 1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
0	最大	255	266	271	266	249	236	238	252	269	265	256	253
	最小	210	219	206	188	182	103	137	167	207	203	202	195
10	最大	223	244	264	271	270	262	265	266	266	248	228	225
	最小	179	184	193	183	192	129	158	176	196	181	176	162
20	最大	183	213	246	271	284	284	282	272	252	224	190	182
	最小	134	140	168	170	194	148	172	177	176	150	138	120
30	最大	136	176	218	261	290	296	289	271	231	192	148	126
	最小	76	96	134	151	184	163	173	166	147	113	90	70
40	最大	80	130	181	181	286	298	288	258	203	152	95	66
	最小	30	53	95	125	162	173	172	147	112	72	42	24
50	最大	28	70	141	210	271	297	280	236	166	100	40	26
	最小	10	19	58	97	144	176	155	125	73	40	15	7
60	最大	7	32	107	176	249	294	268	205	126	43	10	5
	最小	2	4	33	79	132	174	144	100	38	26	3	1

〔注〕 表中能量值单位，cal/(cm²·d)，1 cal=4.1855 J。

来确定

$$\sin\alpha = \sin\phi \cdot \sin\delta + \cos\phi \cdot \cos\delta \cdot \cos h \qquad (1\cdot110)$$

式中：

Φ——纬度，rad；

δ——太阳的偏角，rad；

$$\delta = \frac{23.45}{180}\pi\cos\left[\frac{2\pi}{360}(172-D)\right]$$

D——一年中的天数（1月1日＝1）；

h——太阳的小时角度，rad；

$h \doteq \pi \times$（日照小时数—12）。

当希望在一个时间步长内取$\sin\alpha$的平均值而不用瞬时值时，则太阳角度可采用

$$\alpha\ (\text{弧度}) = \sin^{-1}(\overline{\sin\alpha}) \qquad (1\cdot111)$$

$$\overline{\sin\alpha} = (h_2 - h_1)\int_{h_1}^{h_2} \sin\alpha\ dh$$

$$= \sin\phi \cdot \sin\delta + \cos\phi \cdot \cos\delta \cdot \frac{\sin h_2 - \sin h_1}{h_2 - h_1}$$

方程（1·109）中的常数A和B，用布罗德（Broady），克特拉维斯（ctraves）和吉格(Geger)(1969年)的以下算式计算：

$$A = 2.2 + \frac{C\gamma^{0.7}}{4} - (C\gamma^{0.7} - 0.4)^2/0.16$$

$$B = -1.02 + \frac{C\gamma^{0.7}}{16} + \frac{(C\gamma^{0.7} - 0.4)^2}{0.64}$$

式中：

$C\gamma$——云层率，$C\gamma = 1 - \frac{H_s}{H_{sm}}$

H_{sm}——是晴天的太阳辐射。

（二）大气长波的净辐射H_l

大气长波辐射波长范围为4到120μm之间，大气长波辐射的强度取决于气温和湿度，可按斯蒂弗-博尔茨曼（Stefar-Boltzman）定律表示：

$$H_a=\sigma\varepsilon_a T_a^4 \tag{1·112}$$

式中：

H_a——由大气长波辐射引起的热能通量，〔$ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}$〕；

T_a——以绝对温度表示的在水面以上2m高处的气温，〔Θ〕，T_a（K）$=T_a$（℃）$+273$；

ε_a——大气的发射率，它与湿度有密切关系，ε_a可按晴天情况来表示，对多云天气加以校正。无云层覆盖的大气发射率，在气温高于和低于冰点时，艾德索-杰克逊（Idso-Jackson）（1969）公式可给出精确的结果，$\varepsilon_{ac}=1-0.261\exp[-0.74\times10^{-4}T_a^2(℃)]$，然后用博尔茨（Bolz）公式求$\varepsilon_a$，

$\varepsilon_a=\varepsilon_{ac}(1+KC_r^2)$；

C_r——云层覆盖的比例；

K——由云层高确定的系数，K值在0.04—0.25间，美国田纳西工程管理局（1968年）经研究推荐平均值$K=0.17$；

σ——斯蒂弗—博尔茨曼（Stefan-Boltzmann）常数〔$ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}\Theta^{-4}$〕

$\sigma=5.67\times10^{-8}$，W/（$m^2\cdot K^4$）。

水面对大气辐射的反射可由反射率系数γ_a来计算，反射率系数：

$$\gamma_a=H_{ar}/H_a\approx0.03$$

由水到大气的长波（波长为4—120μm）返回辐射是水体热损失的重要部分。由于水作为一个近乎黑体，其返回辐射引起的热损失率H_b可由斯蒂弗-博尔茨曼四次方定律计算

$$H_b=\sigma\varepsilon_w T_s^4 \tag{1·113}$$

式中：

H_b——长波返回辐射的热能通量，〔$ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}$〕；

T_s——水面的绝对温度，〔Θ〕，

T_s（K）$=T_s$（℃）$+273$；

ε_w——由于河水并非是绝对黑体，ε_w为修正系数，

$\varepsilon_w=0.97$。

水面的净长波辐射热通量H_l由大气入射H_a、大气辐射的反射H_{ar}以及水面返回辐射H_b三部分组成。即

$$H_l=\sigma(\varepsilon_w T_s^4-\varepsilon_a T_a^4)-0.03\sigma\varepsilon_a T_a^4$$

$$=\sigma(\varepsilon_w T_s^4-1.03\varepsilon_a T_a^4) \quad (1\cdot114)$$

（三）蒸发和对流的净热输移　（H_e+H_c）

1）在稳态条件下，蒸发引起的热通量可表示为

$$H_e=\rho L(Wft_n)_z(e_s-e_a) \quad (1\cdot115)$$

式中：

H_e——蒸发的热通量，〔$ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}$〕；

ρ——水的密度，〔ML^{-3}〕；

L——水的蒸发潜热，〔$ML^2T^{-2}M^{-1}$〕；

e_s——水面温度为T_s时的饱和蒸气压力，〔$ML^{-1}T^{-2}$〕；

e_a——离水面高度为Z处的空气中水蒸气的分压力，〔$ML^{-1}T^{-2}$〕；

$(Wft_n)_z$——离水面高度为Z处的以风速表示的风函数。

水的蒸发潜热L可用下式计算

$$L=597.31-0.5631T_s\ (\text{cal/g}) \quad (1\cdot116)$$

式中：

T_s——水面温度，°C。

水的蒸气压力可用马格纳斯-蒂托斯（Magnus-Tetons）公式计算

$$e_s=6.1078\exp\left(\frac{17.26939(T_s(K)-273.16)}{T_s(K)-35.86}\right)\ \text{mbar} \quad (1\cdot117)$$

一般来说风函数$(Wft_n)_z$，包括了自由对流和强迫对流两者对蒸发输移的影响。已有几种定量确定的方法，大多以在特定

位置下的时间平均风速函数来表示。

麦克里诺-哈贝克（Macrino-Harbeck）（1954年）对天然水体提出了以下公式

$$(Wft_n)_z = a + bW_z \qquad (1\cdot118)$$

式中：W_z——高于水面z处的风速，〔LT^{-1}〕；

a，b——经验常数。

布雷迪（Brady），格雷夫斯（Graves）及盖耶（Geyer）（1969年）对电站冷却池采用

$$(Wft_n)_z = a + bW_z^2 \qquad (1\cdot119)$$

舒尔雅科斯基（Shulyakoski）（1969年）对有热负荷的水体的风函数公式增加了自然对流项

$$(Wft_n)_z = a + bW_z + c\ (\Delta\theta_V)^{1/3} \qquad (1\cdot120)$$

$$\Delta\theta_V = T_s\left(1 + 0.378\frac{e_s}{p_a}\right) - T_a\left(1 + 0.378\frac{e_a}{p_a}\right) \qquad (1\cdot121)$$

式中：

a,b,c——经验常数；

$\Delta\theta_V$——水面空气和高于水面 2m 处空气的实际温度差，（$\Delta\theta_V = \theta_{V_s} - \theta_{V_a}$）是反映密度差的理论温度差，〔$\Theta$〕；

θ_{V_s}——与水面温度下饱和潮湿空气的密度相同的干燥空气的实际温度，〔Θ〕；

θ_{V_a}——与水面上 2 m 高处饱和潮湿空气的密度相同的干燥空气的实际温度，〔Θ〕；

T_a——气温；〔Θ〕；

T_s——水面温度，〔Θ〕；

p_a——大气压力，〔$MLT^{-2}L^{-2}$〕。

瑞安（Ryan）及哈莱曼（Harleman）针对大量的研究是在天然水温下进行的，故将式（1·120）进行了修正（$a = 0$），得

$$(Wft_n)_z = bW_z + c\ (\Delta\theta_V)^{1/3} \qquad (1\cdot122)$$

由式（1·115）和式（1·120）可综合成完整的蒸发净热通量H_e的计算公式为

$$H_e=[a+bW_z+c(\Delta\theta_V)^{1/3}](e_s-e_a) \qquad (1·123)$$

2）水气交界面上对流的热通量正比于两种介质之间的温差

$$H_c=c_0(T_s-T_{az}) \qquad (1·124)$$

式中：

H_c——对流的热通量，$[ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}]$；

c_0——取决于风速的比例系数；

T_s——水面温度，$[\Theta]$；

T_{az}——高于水面2m处的气温，$[\Theta]$。

鲍恩（Bowen）（1926年）提出C_0应包含同蒸发热转移相同的风函数，即

$$H_c=0.61\frac{p_a}{1000}\rho L(Wft_n)_z(T_s-T_{az}) \qquad (1·125)$$

式中：　p_a——大气压力，mbar。

上述各项代入式（1·106）中相加，可求得通过水气交界面的净热通量$\triangle H$，从而可求得单位水表面积的净热通量H_n。值得注意的是H_n是由气象条件（辐射、气温、相对湿度、风速）和实际水面温度两者所确定的，而气象条件与水温又是随时间而变化的，故在使用数据时必须规定好时间的尺度。

（四）总的净热交换通量

净热交换方程的一般形式是非线性的，它取决于水面温度。在一定的表面温度范围内，方程可以被线性化。在研究解析解或简单的稳态数据模型时，线性化方程具有明显的优点。

为减少解析解推导和数值计算的复杂性，许多研究者提出了作水温的线性函数来计算热通量的方法。这种线性化的方法，只在有限的水温范围内有效。

埃丁杰（Edinger）、杜特魏勒（Duttweiler）和盖耶（Geyer）（1968年）引进了一个假设的平衡温度T_e，水气交界面的

净热通量可表示为

$$H_n = -k_s\ (T_s - T_e) \tag{1·126}$$

式中： H_n——水面的净热通量，$[ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}]$；

T_s——水的表面温度，$[\Theta]$；

T_e——假设的平衡温度，$[\Theta]$；

k_s——水面体积的热交换系数，$[ML^2T^{-2}T^{-1}L^{-2}\Theta^{-1}]$。

对气象条件给定的条件下，水气夕界面的净热通量H_n与水面温度T_s的确切非线性函数与近似线性函数关线，可用图1-17的典型形状来表示。

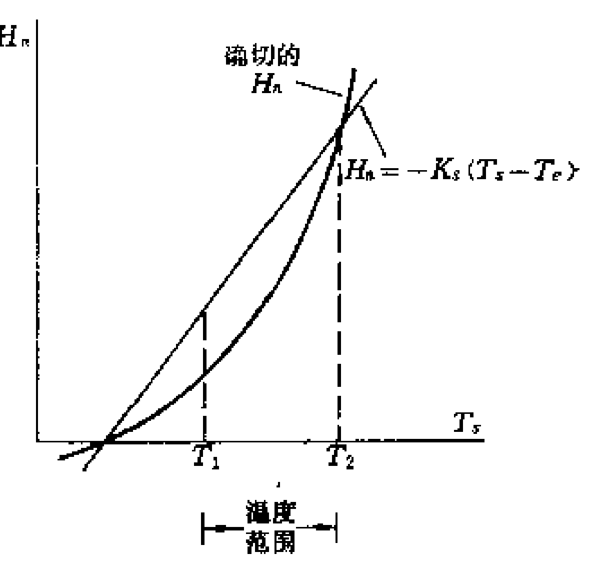


图1-17 表面净热通量与水面温度的关系

当水面温度等于假设的平衡温度T_e时，水气交界面的热交换率应等于零。如果所关心的温度范围T_1到T_2是给定的，则线性方程的近似解即可确定。k_s表示该温度范围内的有效热交换系数，反映了水温对气候条件的关系。如果水面温度$T_s \doteq T_e$或k_s小(无风、相对湿度高等)的情况，，净热通量就小。当$T_s < T_e$时，表明水体获得热量；当$T_s > T_e$时，表明水体损失热量。而且获得率和损失率同（$T_s - T_e$）差值成正比。

气候条件的变化将引起平衡温度的连续变化。通过温差的作用，水温又不断地趋于平衡温度。通常情况下，作为每天、每年中的冷热循环交替的变化中，小时平均水温一天内两次穿过日平衡温度，而月平均水温一年内两次穿过年平均温度。

三 水面热交换系数及平衡温度的计算

（一）水面热交换系数k_s的计算

由于水气交界面的平衡温度T_e是由水面温度 T_s引起的热交换过程（返回辐射H_b、蒸发H_e和传导H_c）对单位水面的冷却能力所决定的，因此水面热交换系数：

$$k_s = \frac{dH_b}{dT_s} + \frac{dH_e}{dT_s} + \frac{dH_c}{dT_s} \tag{1·127}$$

式中：

k_s—水表面热交换系数，W/（m^2·℃）；

T_s—水面温度，℃；

$H_b = \sigma e_w T_s^4$，（W/m^2）；

H_e =（Wft_n）（$e_s - e_a$），（W/m^2）；

$H_c = c_1$·（Wft_n）（$T_s - T_{az}$），（W/m^2），

$c_1 \approx 0.24 \sim 0.28$。

将以上三项（H_b、H_e、H_c）分别对T_s微分并叠加得

$$k_s = 15.7 + (\beta + 0.26)(Wft_n)_z \tag{1·128}$$

式中：

$\beta = \frac{e_s - e_a}{T_s - T_d}$；　　T_d = 露点温度；

$(Wft_n)_z$——高于水面Z^m处的风函数。

式1.128表明热交换系数k_s的变化取决于三个因素：

1） 水面温度T_s。

2）随T_s的增长而增长的饱和蒸气压力曲线上两点之间的斜率β（见图1-18）。需由T_s来定β。在不同温度下，以标准拟合曲线的方法可得到如下的表达式

$$\beta = 0.255 - 0.0085T + 0.000204T^2 \tag{1·129}$$

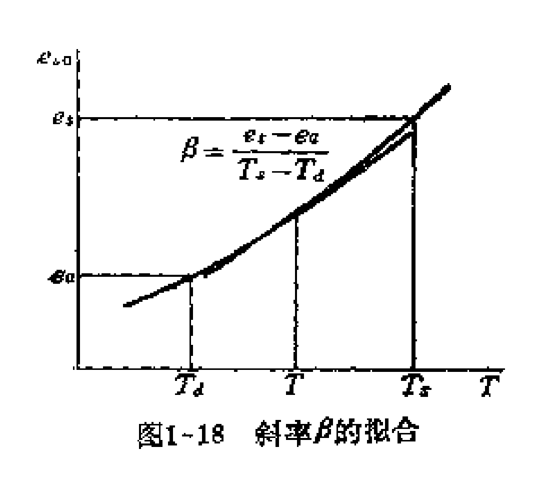


图1-18　斜率β的拟合

式中：温度T以℃表示。

若假设曲线上点T_s和T_d之间弦的坡度同中点的正切是相的同，则可认为平均温度：

$$T = Tm = (T_s + T_d)/2 \quad ℃ \qquad (1·130)$$

8）风函数 $(Wft_n)_z$

假设风函数的一般形式为：

$$(Wft_n)_z = a + bW_z + c\ (\Delta\theta_V)^{1/3} \qquad (1·120)$$

式中：a、b、c——常系数。

对具有轻微热负荷，垂向混合的湖泊，风造成水面摩擦所引起的能量损失（以及由此而增加的扩散率）据统计是与风速W_Z的平方成正比，可采用以下稍偏保守的公式

$$(Wft_n)_z = 70 + 0.7W_z^2 \qquad (1·131)$$

式中：W_z——是水面上10m高处量测的风速，（m/s）。

因此，在给定W_z和T以后，可由式（1·128）、（1·129）、和（1·131）来确定水表面热交换系数。其结果如图1-19所示，它可以作为一个估算k_s值设计图之用。

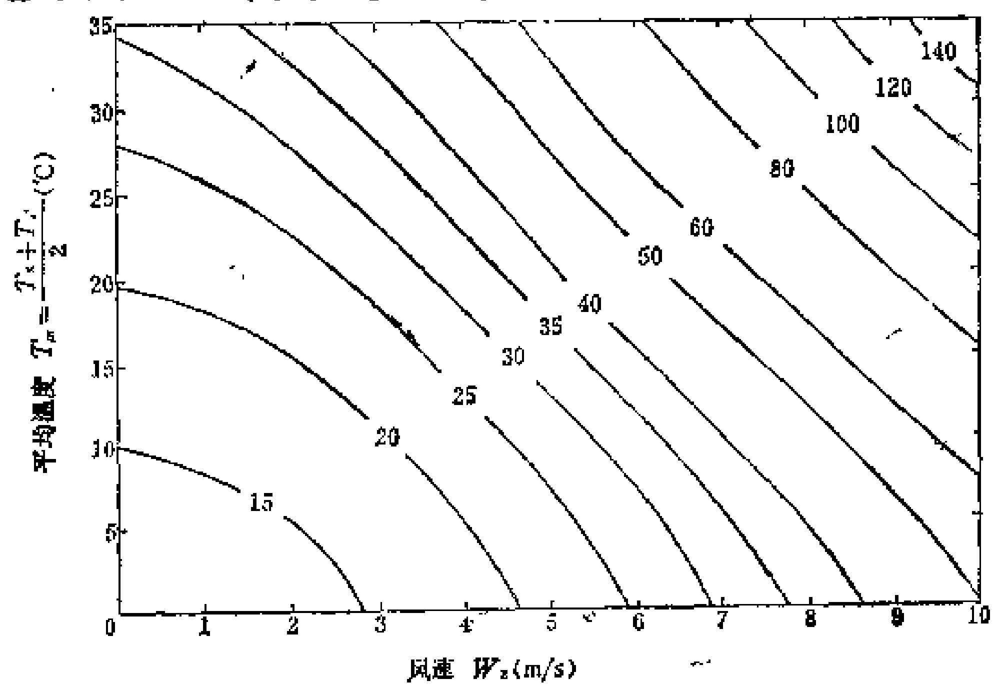


图1-19 根据方程1·128、1·129、1·131求表面热交换系数k_S(W/m²·℃)的计算图

（二）平衡温度T_e的计算

布雷迪、格雷夫和益耶（1969年）曾提出了估算平衡温度T_e的经验近似关系式：

$$T_e = T_d + \frac{H_s}{k_s} \tag{1·132}$$

式中：T，T_e——露点温度与平衡温度，（℃）；

H_s——太阳短波的净辐射率，（W/m^2）；

k_s——水面热交换系数，W/（m^2·℃）。

露点温度T_d在一天内相对比较稳定，T_e随小时的变化主要是由太阳短波辐射变化引起的。

【例题1—1】

画出河水有机物衰减速率系数k_1分别为0.1，0.2，05，1.0时，5天内的衰减曲线。

应用公式（1·24）可计算得到不同k_1下，t与L/L_0的值，从而可画得以下曲线（图1-20）

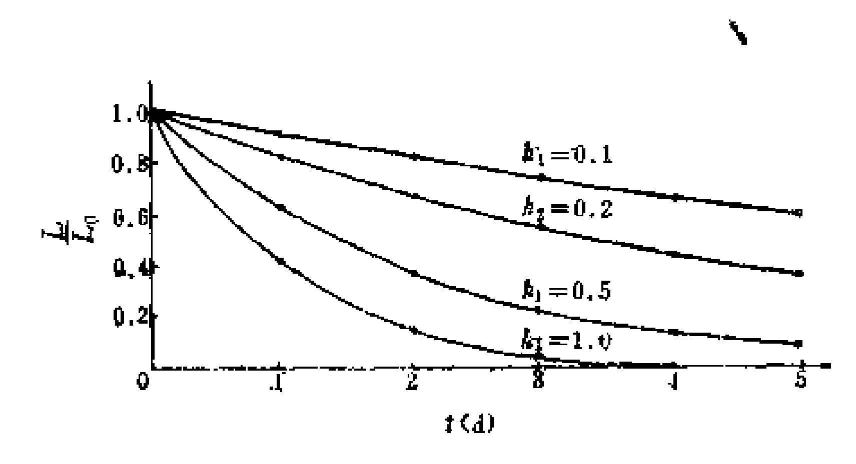


图2-10　河水中不同有机物衰减速率系数K_1下的衰减曲线

【例题1—2】

已知 $k_1(20℃)=a$，求$k_1(30℃)$：$k_1(20℃)$，$k_1(30℃)$：$k_1(10℃)$，$k_1(20℃)$：$k_1(10℃)$：和$k_1(20℃)$：$k_1(5℃)$。

解：10℃，20℃，30℃时温度系数θ取1.047，5℃时，θ取1.065。

$k_{1(30℃)}/k_{1(20℃)} = (1.047)^{10} = 1.583$

$k_{1(30℃)}/k_{1(10℃)} = (1.047)^{20} = 2.506$

$k_{1(20℃)}/k_{1(10℃)} = (1.047)^{10} = 1.583$

$k_{1(20℃)}/k_{1(5℃)} = (1.065)^{15} = 2.572$

【例题1—3】 求5℃、20℃、28℃时水中饱和溶解氧浓度。

解： 由 $O = \dfrac{468}{31.6 + T}$

$O_{(5℃)} = \dfrac{468}{31.6+5} = 12.78 \quad mg/l$

$O_{s(20℃)} = \dfrac{468}{31.6+20} = 9.07 \quad mg/l$

$O_{s(28℃)} = \dfrac{468}{31.6+28} = 7.85 \quad mg/l$

【例题1—4】 某河段长度为10km，始端河水NH_3-N浓度为10mg/l，已知河水流速为0.4m/s，$k_{N(20℃)} = 0.56d^{-1}$，求该河段终端水温为23.7℃时河水的NH_3-N浓度。

解：

水温为23.7℃时NH_3-N的衰减速率系数为

$k_{N(23.7℃)} = k_{N(20℃)}(1.017)^{(23.7-20)}$

$= (0.56)\ (1.064) = 0.6 \quad d^{-1}$

河段终端河水的NH_3-N浓度

$L_N = L_{N(0)}e^{-k_N t}$

$= 10 \cdot e^{-(0.6\cdot 10)/(0.4\cdot 86400)} = 10\cdot e^{-0.6\cdot 0.29}$

所以 $L_N = 10\cdot 0.84 = 8.4mg/l$

【例题1—5】 取某河两个断面的底泥样品，测得其平均耗氧速度分别为0.02和0.03g(O_2)/($m^2\cdot h$)。该河段平均水深为2m。求该河段底泥的需氧量。

断面 1 的耗氧速度：$0.02\times24=0.48g/(m^2\cdot d)$底泥需氧量为 $0.08/2=0.24mg/(l\cdot d)$

断面 2 的耗氧速度：$0.03\times24=0.72g/(m^2\cdot d)$底泥需氧量为 $0.72/2=0.36mg/(l\cdot d)$。

【例题1—6】 某河平均水深为1.5m，用奥康纳—多宾斯公式计算当该河段平均流速分别为0.1和0.2m/s时的再曝气系数

$$k_2=\frac{(D_M u)^{0.5}}{h^{1.5}}$$

$D_M=2.036\times10^{-9}m^2/d$。

当 $u=0.1h$，

$$k_2=\frac{(2.036\times10^{-9}\times0.1)^{0.5}}{1.5^{1.5}}\times86400$$

$$=\frac{1.427\times10^{-5}}{1.837}\times86400$$

$$=0.67d^{-1}$$

当 $u=0.2h$

$$k_2=\frac{(2.036\times10^{-9}\times0.2)^{0.5}}{1.5^{1.5}}\times86400$$

$$=095d^{-1}$$

第二章　河流水质模型

第一节　水质模型的开发与分类特性

一　水质模型的发展概况

自1925年斯特里特-费尔普斯（Streeter-Phelps）第一次建立水质模型以来，国际上对水质模型的开发与研究可分为如图2-1所示的四个发展阶段。

第一阶段（1925—1965年）：开发了比较简单的生物化学需氧量和溶解氧（BOD-DO）的双线性系统模型。对河流和河口问题采用了一维计算方法。

第二阶段（1965—1970年）：随着计算机的应用以及对生物化学耗氧过程认识的深入，除继续研究发展BOD-DO模型的多维参数估值问题外，水质模型发展为六个线性系统，计算方法从一维进到二维，除河流、河口问题外，开始计算湖泊及海湾问题。

第三阶段（1970—1975年）：研究发展了相互作用的非线性系统模型。涉及到营养物质磷、氮的循环系统，浮游植物和浮游动物系统，以及生物生长率同这些营养物质、阳光、温度的关系，浮游植物与浮游动物生长率之间的关系。其相互关系都是非线性的，一般只能用数值法求解，空间上用一维和二维方法进行计算。

第四阶段（1975年以后）：除继续研究第三阶段的食物链问题外，还发展了多种相互作用系统，涉及到与有毒物质的相互作用。空间尺度已发展到三维。随着模型的复杂化，要准确描述模型的性质是很困难的。某些模型中状态变量的数目已大大增加，

有20个或更多状态变量的水质模型已不少见。目前对环境的污染问题，已发展到将地面水、地下水的水质水量与大气污染相互结合，建立综合模型的研究阶段。

水质模型的实际应用是过去十几年内才迅速开展的。表2-1列出了美国通用水质模型及其研究单位情况。表2-2列出了某些美国通用水质模型的应用范围及其功能。

二 水质模型的分类特性

面临为数众多的各种水质模型，在进行水质模拟预测时，需要从模型的内容和形式作出恰当的选择。一般说来，较复杂的模型可以较全面地反映客观实际，但为了确定模型及其参数需要较多的信息量。各种模型都有其推导的条件和使用的要求。我们应当根据实际的需要，就模型的复杂程度、可能提供的信息和人力、物力等几个方面选择适当的模型。了解水质模型的种类及其特性，将有助于模型的选择或建立。

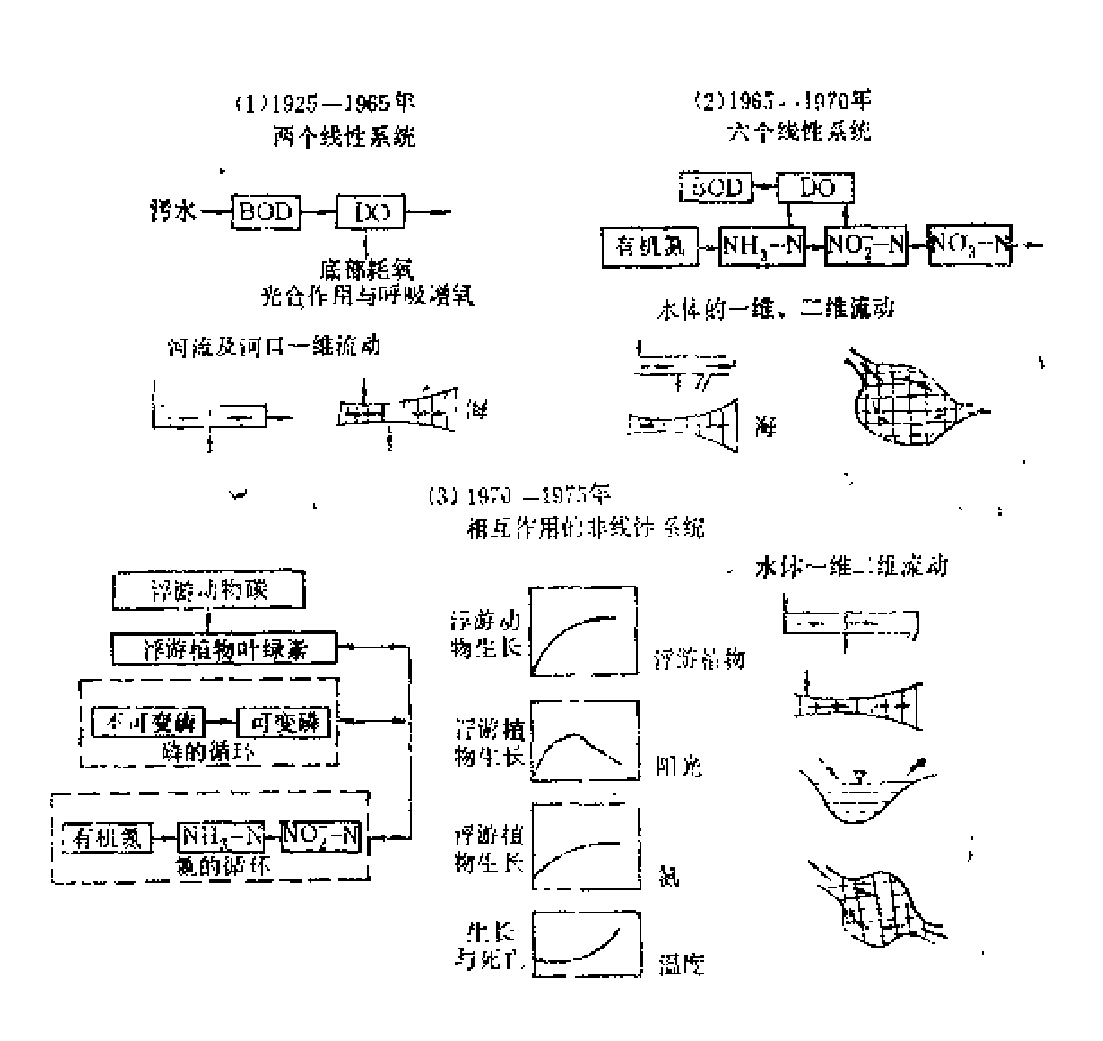
1）从使用管理的角度来说，水质模型可分为：河流、河口（受潮汐影响）模型，湖泊、水库模型，海湾模型等。一般河流和河口模型比较成熟，湖、海模型比较复杂，可靠性小。

2）从水质组分来说，主要模拟的水质对象是有机污染物，它是一种典型的水体污染，综合反映耗氧有机物的BOD-DO（溶解氧）水质模型具有普遍的重要价值，也是比较成熟的模型。各种结构较为简单的一般可降解有机物（如挥发酚），无机盐，悬浮物质，放射性物质等的单组分水质模型也都达到了实用化的程度。

重金属在水体中的迁移转化，涉及到许多复杂的过程（包括食物链的问题）目前的认识和表达还存在着许多不足和困难。

微量的难降解的有机物，由于其迁移转化过程的特殊性，目前对它认识还较差，其模拟预测还有很多困难。

营养物质（如磷、氮）在水体中（尤其在湖泊中）的非线性时变反应，国际上已作了很多研究，具备了模拟的初步条件，但



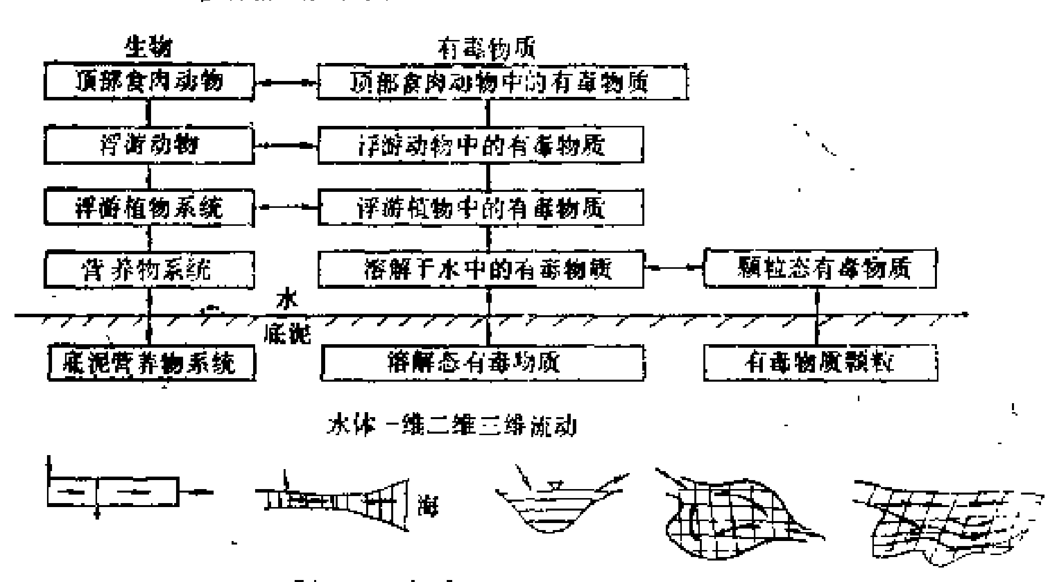


图2-1　水质模型的研究发展概况

表2-1 美国通用的水质模型

类别	解法	模型	模型简写字母	研究单位
化学反应模型	解析解	斯特里特-费尔普斯（Streeter-Phelps）溶解氧方程	＼	印地安纳州卫生部
		营养物参数预算模型	＼	俄勒冈州加拿大水产研究部内陆水中心
		磷的长期平衡模型	＼	华盛顿州贝特莱（Battelle）太平洋西北试验室
		河网稳态模型	SNSIM	纽约州美国环境保护局——Ⅱ区
		简化河流模型	SSM	新泽西州水科学公司
		简化河口模型	SEM	新泽西州水科学公司
	数值解	溶解氧衰减模型	DOSAG-1	德克萨斯州德克萨斯水开发部
		溶解氧衰减模型（修改型）	DOSAG-3	德克萨斯州水资源工程咨询公司
		SCI溶解氧衰减修改模型	COSCI	加里佛尼亚州系统控制公司
		河口模型	ES001	纽约州美国环境保护局——Ⅱ区
		自动型水质模型	AUTO-QUAL	华盛顿特区美国环境保护局
		河流水质模型	QUAL-1	德克萨斯州德克萨斯水开发部
		河口动态模型	DEM	加利福尼亚州水资源工程咨询公司
		潮汐温度模型	TTM	俄勒冈州美国环境保护局太平洋西北试验室
		SWMM组合式受纳水体模型	RECEIV	加利福尼亚州水资源工程咨询公司
		受纳水体模型（修改型）	RIVSCI	加利福尼亚系统控制公司
		受纳水体模型（修改型）	WRECEV	德克萨斯州水资源工程咨询公司
		深水库模型	DRM	加利福尼亚州水资源工程咨询公司

续表

类别	解法	模型	模型简写字母	研究单位
化学反应流模型	数值解	湖泊生态模型（修改的深水库模型）	LAKSCI	加利福尼亚州系统工程公司
		水库水质模型	EPARES	德克萨斯州水资源工程咨询公司
		水力计算及水文模拟程序	HSP	加利福尼亚州水力计算公司
		水质反馈模型（HARO3的修改）	FEDBAKO3	纽约州美国环境保护局——Ⅱ区
		海岸环流及离散模型	CAFE/DISPER	麻省理工学院劳尔菲M·派生斯(Ralph M.Parsons)试验室
		河口水质模型	EXPLORE-1	华盛顿州贝脱莱太平洋西北试验室
		营养物累积模型	SPLOTCH	纽约州美国环境保护局
		三维河流混合模型	＼	华盛顿特区美国地质局水资源处
		下落羽流模型	PLUME	俄勒冈州美国环境保护局太平洋西北实验室
		维拉曼蒂（Willamette）河流模型	WIRQAS	华盛顿特区美国地质局水资源处
生态模型		河口水动力学/盐度模型	HYD/SAL	德克萨斯州德克萨斯水开发部
		河流水质模型（QUAL-1的修改）	QUAL-Ⅱ	加利福尼亚水资源工程咨询公司
		湖泊态生模型（DRM的修改）	LAKECO	加利福尼亚水资源工程咨询公司
		河口生态模型	ECOMOD	华盛顿特区美国环境保护局
		河口水生态模型	ESTECO	德克萨斯州德克萨斯水开发部水资源工程咨询公司
		湖泊浮游植物模型	LAKE-1	纽约州曼哈顿学院土木工程系
		湖泊富营养化模型	＼	华盛顿州贝脱莱太平洋西北试验室
		湖泊生态模型	CLEAN-CLEAER	纽约州兰塞楼(Rensselaer)科技学院国家生态程序
		水库系统中心的模型	WQRRS	加利福尼亚州美国陆军工程兵团水文工程中心
		纳拉琴塞脱(Naragansett)海湾水动力学模型	＼	罗德岛州罗德岛大学海洋工程系

这些模型的建立需要很多的数据、时间和较高的技术。

浮游植物（微生物）：一般通过水体中的叶绿素或碳的含量大小来表达。

水温是水质因素中的一个重要变量，它不仅是确定其它水质指标（如溶解氧浓度或污染物浓度）的有关因素，而且水体中的鱼和与食物链有关的生物等对水温的变化非常敏感。因此建立水温的相关模型有其重要意义，在这方面已开展了大量的研究，达到了实用化的程度，其中湖泊、水库的温度模型，涉及到较多热过程及其相关资料。

多组分的水生生态模型，反映了各种组分相互作用的非线性系统，它详细和综合地描述了水体中存在的各种因素的关联，这种模拟是很有用的，但需要更多的数据和计算时间，也难于轻易获得成功。

3）从水质系统的状态来说，水质模型可区分为稳态的和非稳态的以及确定性的和随机性的。如果水体的水文条件和排污条件所构成的水质状态，处于稳定，此时水体污染物的浓度不随时间变化，模型的解就可以大为简化。一般河流在低流量时期（如早夏、晚夏或早秋）往往也是水温较高的时候，此时对排污定常的河段，不仅水流稳定，而且河水的重要水质指标——溶解氧大体上处于一年中最不利的时期，这正是我们十分关心的临界状态，因此一般的河流可以采用稳态的水质条件进行模拟和预测。对于瞬时突然排污（如河流中释放示踪剂、季节性工矿排污和工矿事故排污）、以水库人工调节流量而且变化频繁（如时变化计）的河道，涨潮或退潮时的河口以及暴雨径流所引起的河水水质变化等，都属于不稳定流的状态，需要用动态或准动态的水质模型来描述。对于周期性水文变化规律，需要借助于不稳定的水文预报的方法和资料，对于排污的周期性变化，需要借助于大量的厂矿企业和城市的排污统计资料，在缺少数据的情况下，难于达到动态水质模型的预期效果。对于暴雨径流污染的水质预测，还需要

研究降雨、径流冲刷所产生的污水及其成分以及流域面上的汇流和集污问题，现象复杂、难度较大，尚处于探索开发中。

目前绝大多数都采用确定性模型来模拟水质，此时对一组给定的输入条件，模型的解只有一个确定值。虽然有关数据本身均带有随机性，用概率水质模型来表达更能反映实际，但由于随机模型的识别需要对各变量都以概率分布的数据来定量，而不能用平均值，这是很困难的。如果水质模型中的流量值采用频率统计值，则该水质模型带有随机的特性。

4）从污染物在水体中的迁移转化过程来说，虽然在自然环境中平流、扩散都起作用，但在某种条件下，其中一种过程可能起主导作用。从而可区分为完全混合型、平流型、平流扩散型三种水质模型类。从反应动力学来说，又可区分为：纯反应型、惰性物质的纯迁移型、迁移反应型以及生态模型。后者还要描述水动力学特性和水质要素对生物现象在空间和时间上的变化关系。

5）从水质模型的空间维数来说，虽然真实系统一般都是三维结构。在实用上往往采用一维、二维以至零维的水质模型已足够了。一般情况下，对一条中小河流的较长河段，其横向和竖向的污染物浓度梯度可以忽略，而采用只考虑纵向（即水流方向）浓度变化的一维模型来模拟河水的水质。由排污口断面起到竖向和横向两者均匀混合所需要的距离，可以按下述估算公式进行计算（对顺直河段）

$$L_b \geqslant \frac{1.18 b^2 u}{4 h u^*} \tag{2·1}$$

式中：L_b——竖向与横向均匀混合所需的河水流动距离，〔L〕；

b——河流宽度，〔L〕；

u——河流断面的平均流速，〔T^{-1}〕；

h——河流平均水深，〔L〕；

u^*——河流摩阻流速（或“剪切流速”），〔LT^{-1}〕；

$u^* = \sqrt{ghI}$;

g——重力加速度，〔LT^{-2}〕；

I——河流水力坡降（或“河底比降”）。

当排污口以下的距离大于上述 L_b 值时，采用一维水质模型可以取得很好的近似。

对横向混合的纵向距离 L_b内的河流水质，应采用二维水质模型进行模拟计算

对大的水体（如海湾、湖泊及大江）以及水面与水底之间的水质存在实际差别时，横向与竖向的污染物浓度梯度不可忽略，应采用二维或三维水质模型。

对区域水质进行粗略估算，也可以采用零维水质模型。

6）从一维河流水质模型来说，当考虑非稳态的情状时，可根据条件，分别采用突发性瞬时排污的解析模型、阶梯状集中连续排污的解析模型或有限差分水质模型。对于一维稳态河流的BOD-DO模型：通用性较强的是多宾斯-坎普（Dobbins-Camp）模型，它全面地考虑了河水中溶解的CBOD、可沉浮的CBOD和因底泥中生化反应所释放的CBOD（或因地表径流引起CBOD的变化）的迁移和反应；同时还考虑了与此相应的耗氧作用，大气向河水的复氧作用、藻类的呼吸和光合作用等所引起的溶解氧变化。当可以忽略底泥释放BOD（如底泥沉积物很少）、藻类作用（如河流中未发现藻类生长，或经测定河流昼夜的河水溶解氧变化很小等）及地表径流影响时，多宾斯-坎普模型就可以简化为托马斯（Thomas）水质模型。除上述条件外，还可以忽略河水中悬浮物的沉浮作用（如排放的废水悬浮固体很少或已经沉淀处理，河流的流速较低等），则托马斯模型可简化为斯特里特-菲尔普斯BOD-DO模型。当污染物在河流中停留时间较长，或污水已经碳化阶段处理，以及河流中硝化作用明显时，需要考虑NBOD的衰减及其耗氧作用，此时应采用奥康纳（O'Connor）模型来代替托马斯或斯特里特-菲尔普斯模型。

第二节 河流水质模型基本方程及其解

一 河流水质模型基本方程的推导

针对污染物在河流中的不同混合状况，可分别由空间不同维数推导出以下各种河流水质模型的基本方程。

（一）零维水质模型的基本方程

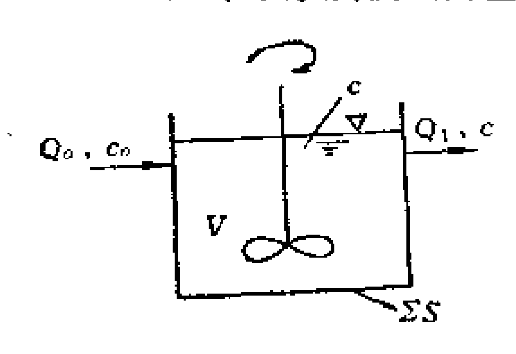


图2-2 完全混合反应槽

如果将一个河段或一个单元水体，看成是如图 2-2 的完全混合反应槽。入流量为 Q_0、浓度为 c_0 的污水，进入该系统后，即由于槽内搅拌作用，污染物瞬即完全均匀分布到整个槽内，其浓度为c。

当水质为非稳态，流量为不稳定流量时，由质量平衡关系可建立以下的基本方程：

$$\frac{dVc}{dt}=(Q_0c_0-Q_1c)+\Sigma S'(c,t) \tag{2·2}$$

$$\frac{dV}{dt}=Q_0-Q_1+q \tag{2·3}$$

当V为常数时

$$\frac{dc}{dt}=\frac{Q_0}{V}c_0-\frac{Q_1}{V}c+\Sigma S\ (c,t) \tag{2·4}$$

式中： c_0, c——流入反应槽内和槽内水中的污染物浓度，$[ML^{-3}]$；

Q_0,Q_1——入流和出流的流量，$[L^3T^{-1}]$；

V——反应槽内水的体积，$[L^3]$；

ΣS——反应槽的源（添）、漏（衰）项，$[ML^{-3}T^{-1}]$；

q——源漏项的流量，$[L^3T^{-1}]$。

当反应槽内的源漏项，仅为反应衰减项 $-kc$，则零维水质模型的基本方程变为

$$\frac{dc}{dt}=\frac{Q_0}{V}c_0-\frac{Q_1}{V}c-kc \tag{2·5}$$

式中：k——污染物的衰减反应速率系数，$[T^{-1}]$。

当水质为稳态且源漏项包括反应衰减项和旁则入流项时，则零维的稳态水质模型基本方程为

$$0=\frac{Q_0}{V}c_0-\frac{Q_1}{V}c-kc+qc^* \tag{2·6}$$

经整理可得

$$c=\frac{1}{\left(1+\frac{Vk}{Q_1}\right)}\left(\frac{Q_0}{Q_1}\right)c_0+\frac{1}{\left(1+\frac{Vk}{Q_1}\right)}\left(\frac{q}{Q_1}\right)c^* \tag{2·7}$$

式中：Q_0，Q_1，q——入流、出流和源漏项(如侧向)入流流量 $[L^3T^{-1}]$，$Q_1=Q_0+q$；

c_0，c，c^*——入流、出流和源漏项入流的污染物浓度 $[ML^{-3}]$；

k——污染物的衰减反应速率系数，$[T^{-1}]$。

当稳态水质且源漏项仅为反应衰减项（即 $q=0$）时，则零维的稳态水质模型基本方程变为

$$c=\frac{c_0}{1+\frac{kV}{Q}} \tag{2·8}$$

式中：c_0，c——入流、出流的污染物浓度，$[ML^{-3}]$；

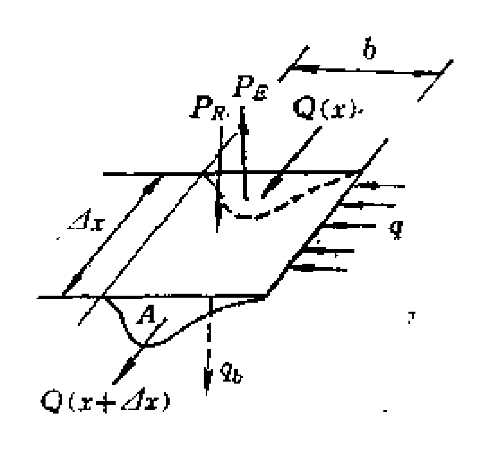
Q——入流和出流的流量，$[L^3T^{-1}]$；

k——污染物衰减速率系数，$[T^{-1}]$。

（二）一维河流水质模型的基本方程

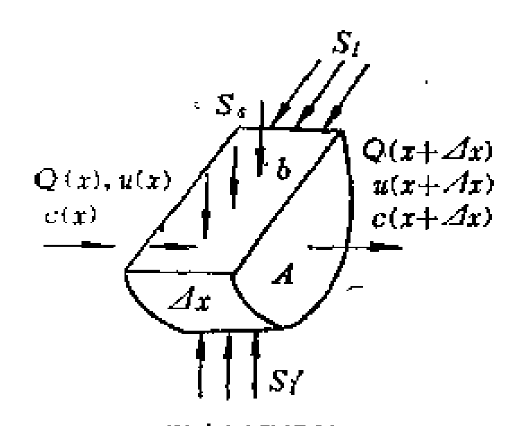
1．水量平衡基本方程

考察如图2-3所示的长度为Δx微小河段，在Δt时段内的水质量平衡关系可得：



微小河段的水量平衡图

图2-3　微小河段水量平衡图



微小河段质量图

图2-4　微小河段质量平衡图

$$\Delta m=\rho\Delta(A\Delta x)$$
$$=[Q(x)-Q(x+\Delta x)]\Delta t+b\Delta x(p_R-p_E)\Delta t$$
$$+(q-q_b)\Delta x\Delta t$$

= 平流项 + 水体与大气交换项 + 侧向与底部入出流项

（2·9）

式中：Δm——Δt时间内微元河段中水质量的增量，〔M〕；

ρ——水的密度，〔ML^{-3}〕；$\rho\doteq1$

A——河床断面积，〔L^2〕；

Δx——河段距离，〔L〕；

Q——流量，〔L^3T^{-1}〕；

Δt——时间间隔，〔T〕；

b——河宽，〔L〕；

p_R、p_E——单位水面的降水量与蒸发量，〔$L^3T^{-1}L^{-2}$〕；

q、q_b——侧向输入和底部渗出流量，〔$L^3T^{-1}L^{-1}$〕。

上式除以$\Delta x\cdot\Delta t$，可改写为

$$\frac{\Delta A}{\Delta t}=-\frac{\Delta Q}{\Delta x}+b\ (p_R-p_E)+(q-q_b) \qquad (2\cdot10)$$

令 $\Delta t\to 0$， $\Delta x\to 0$， 可得

$$\frac{\partial A}{\partial t}=-\frac{\partial Q}{\partial x}+\mathrm{b}\ (p_R-p_E)+(q-q_b) \qquad (2\cdot11)$$

当忽略p_R、p_E和q_b时，则水量平衡的基本方程式为

$$\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{\partial Q}{\partial x}=q \qquad (2\cdot12)$$

反映了一维河流中流量的时一空分布情况。

2．单组份一维河流水质迁移基本方程

考虑如图2-4所示微小河段系统内单组份污染物的质量平衡关系。

（1）仅考虑推流（或平流）流动的作用

由质量平衡关系可写出

$$\Delta m=[c\ (x)\ Q(x)-c\ (x+\Delta x)\ Q\ (x+\Delta x)\ ]\ \Delta t$$
$$+\ (S_l+S'_l)\ \Delta x\Delta t+S_s b\Delta x\Delta t+S_V A\Delta x\Delta t \qquad (2\cdot13)$$

式中： Δm—— Δt 时间间隔内微小河段污染物质量增量，〔M〕；

Sl、Sl'——单位时间、单位长度上侧向和底部的污染物的源漏项（由地面径流和河底渗漏引起的），〔$ML^{-1}T^{-1}$〕；

S_s——单位时间、单位表面积上的污染物源漏项（由底泥释放BOD、降雨、蒸发所引起的），〔$ML^{-2}T^{-1}$〕；

S_u——单位体积水体污染物的源漏项（由BOD_c和BOD_N的降解，藻类的呼吸耗氧和光合作用引起的增氧）〔$ML^{-3}T^{-1}$〕。

有关源和漏的各项，如果源取正值，漏取负值。其它各项符号意

义同前。

上式等式两边各除以（$\Delta x\Delta t$），以Δ（$Ac\Delta x$）代替Δm，并使$\Delta x\to 0$，$\Delta t\to 0$，即可得以下微分方程式

$$\frac{\partial(Ac)}{\partial t}=-\frac{\partial(Qc)}{\partial x}+S_1+S_l'+bS_s+AS_V \tag{2·14}$$

或 $$\frac{\partial(Ac)}{\partial t}+\frac{\partial(Qc)}{\partial x}=AS \tag{2·15}$$

式中： $AS=(S_l+S_l')+bS_s+AS_V$

（2）考察推流和湍流扩散的作用

流场中水质点的污染物浓度与流速采用点的时段平均值以$\bar{c}$、$\bar{u}$表达。此时$c=\bar{c}+c'$，$u=\bar{u}+u'$。（c'和u'分别为湍流扩散时段平均值与瞬时值之间的点浓度和点流速的偏差量）。把此转换关系式代入式2.15，经整理可得到：

$$\frac{\partial(A\bar{c})}{\partial t}+\frac{\partial(Q\bar{c})}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}(I_xA)=AS$$

或 $$\frac{\partial(A\bar{c})}{\partial t}+\frac{\partial(Q\bar{c})}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_xA\frac{\partial\bar{c}}{\partial x}\right)+AS \tag{2·16}$$

式中：D_x——湍流扩散系数，〔L^2T^{-1}〕。

（8）考虑推流、湍流扩散和弥散作用

此时，流场中应用河流断面的平均浓度$\bar{\bar{c}}$和平均流速$\bar{\bar{u}}$来表达。其转换关系为$\bar{c}=\bar{\bar{c}}+c^*$、$\bar{u}=\bar{\bar{u}}+u^*$，（$c^*$、$u^*$为弥散引起的偏差量）。代入式2.16，并经整理可得到如下的一维河流水质基本方程

$$\frac{\partial(A\bar{\bar{c}})}{\partial t}+\frac{\partial(Q\bar{\bar{c}})}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left[(D_x+E_x)A\frac{\partial\bar{\bar{c}}}{\partial x}\right]+AS \tag{2·17}$$

式（2·17）也可简写成

$$\frac{\partial(Ac)}{\partial t}+\frac{\partial(Qc)}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left[(D_x+E_x)A\frac{\partial c}{\partial x}\right]+AS \tag{2·18}$$

对于均匀河段，断面积A为常数时式2.18可写成

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left[(E_x+D_x)\frac{\partial c}{\partial x}\right]+S \qquad (2\cdot19)$$

式中： E_x——弥散系数，$[L^2T^{-1}]$。

对于有弥散作用的河流，一般纵向弥散系数E_x要比湍流扩散系数D_x大得多（$E_x\approx10—10^3$，$D_x\approx10^{-6}—10^{-4}m^2/s$）因此往往可忽略扩散项，则一维河流水质模型的基本方程可改写成

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial x}=E\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+S \qquad (2\cdot20)$$

式中： $E=E_x$。

对于河底无渗漏、忽略侧向输入的BOD_c的一维均匀河流水质模型基本方程则为

$$\frac{\partial L}{\partial t}+u\frac{\partial L}{\partial x}=E\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}-k_1L \qquad (2\cdot21)$$

式中： L——在t时保存有的BOD_C浓度，$[ML^{-3}]$；

u——河流平均流速，$[LT^{-1}]$；

E——纵向弥散系数，$[L^2T^{-1}]$；

k_1——BOD_c反应速率系数，$[T^{-1}]$；

x——河水流动距离，$[L]$。

（三）水质模型的三维基本方程

采用类似一维河流迁移方程的推导过程，可以就一个具有x、y、z坐标的三维空间中任意一点（或微小水团）某污染物的时段平均浓度c（x、y、z）随时间的变化率$\frac{\partial c}{\partial t}$，与该点处污染物的平移、湍流扩散和源漏项的速率的关系，表达为

$$\frac{\partial c}{\partial t}=\left[\frac{\partial}{\partial x}(D_x\frac{\partial c}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(D_y\frac{\partial c}{\partial y})+\frac{\partial}{\partial z}(D_z\frac{\partial c}{\partial z})\right]$$

$$-\left[\frac{\partial(uc)}{\partial x}+\frac{\partial(vc)}{\partial y}+\frac{\partial(wc)}{\partial z}\right]+S \qquad (2\cdot22)$$

式中： c——水体中某点污染物的时段平均浓度，$[ML^{-3}]$；

x、y、z——某点纵向、横向、竖向的坐标，〔L〕；

u、v、w——某点在x、y、z方向上的时平均速度分量〔LT^{-1}〕；

Dx、Dy、Dz——某点在x、y、z方向上的湍流扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

S——污染物的源漏项，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕。

上述三维水质基本方程又称为三维扩散迁移方程。需要注意的是：三维扩散迁移方程是表达某污染物在水体中任意点在三个方向上的时段平均浓度值，此处就不出现以断面平均浓度为表示对象的弥散项与弥散系数。三维扩散迁移方程适用于描述竖向、横向、纵向都没有均匀混合的区域。这一基本方程，在理论上是完整的，但如果要求解和应用它，需要分别知道某时刻空间位置上的污染物浓度，以及u、v、w、D_x、D_y、D_z、和S等的点时段平均值，那是极为困难的。实用上需要针对水体中污染物的不同混合状况进行各种简化。

（四）二维水质模型的基本方程

1.描述竖向（水深方向）均匀混合的水质变化

$$\frac{\partial(hc)}{\partial t}=\left[\frac{\partial}{\partial x}(hD_x\frac{\partial c}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(hD_y\frac{\partial c}{\partial y})\right]-\left[\frac{\partial(uhc)}{\partial x}+\frac{\partial(vhc)}{\partial y}\right]+S \tag{2·23}$$

式中：h——水深，〔L〕。

2.描述横向均匀、竖向分层的水质变化

$$\frac{\partial(bc)}{\partial t}=\left[\frac{\partial}{\partial t}(bD_x\frac{\partial c}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial z}(bD_z\frac{\partial c}{\partial z})\right]-\left[\frac{\partial(ubc)}{\partial x}+\frac{\partial(wbc)}{\partial z}\right]+S \tag{2·24}$$

式中：b——水面宽度〔L〕。

二　一维河流水质模型基本方程的解析解

一维均匀河流水质模型基本方程通式可写成

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial x}=E\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-k_1 c \tag{2·25}$$

对以下几种条件可以用解析法求解。

（一）一维河流基本方程的稳态解

当均匀河段处于定常排污条件，而河流流速和河水中污染物浓度处于稳定时，那末$\partial c/\partial t=0$，则上式可变为

$$\frac{d^2 c}{dx^2}-\frac{u}{E}\frac{dc}{dx}-\frac{k_1}{E}c=0 \tag{2·26}$$

当初始条件和边界条件是：$x=0$、$c=c_0$和$x=\infty$，$c=0$时，可用解特征多项式的方法求解式（2·26）。即上式可变为

$$\lambda^2-\frac{u}{E}\lambda-\frac{k_1}{E}=0 \tag{2·27}$$

其特征值

$$\lambda_{1,2}=\frac{\frac{u}{E}\pm\sqrt{\frac{u^2}{E^2}+4\frac{k_1}{E}}}{2}=\frac{u}{2E}(1\pm m)$$

式中：　$m=\sqrt{1+\frac{4k_1E}{u^2}}$。

式2.27的通解是

$$c=Ae^{\lambda_1 x}+Be^{\lambda_1 x}$$

式中：　A、B——为特定常数。

由于（$1-m$）相应于排污口的下游区（即$x>0$），而（$1+m$）则相应于排污口以上的区域（$x<0$），后者无意义。故应舍去λ_1而取λ_2，即$A=0$。又因$x=0$时，$c=c_0$，故$B=c_0$。从而解得

$$
\begin{cases}
c = c_0 \exp\left[\dfrac{u}{2E}(1-m)x\right] \\
m = \sqrt{1 + \dfrac{4k_1 E}{u^2}}
\end{cases}
\tag{2·28}
$$

（二）忽略弥散作用的一维河流基本方程解

对不受潮汐影响的稳态河流，其弥散作用影响很小，可以忽略，即

$$
\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} = -k_1 c \tag{2·29}
$$

这个偏微分方程可以改写为两个常微分方程表示

$$
\begin{cases}
\dfrac{d[x(t)]}{dt} = u \\
\dfrac{d[c(x(t),t)]}{dt} = k_1 c
\end{cases}
$$

式中： $x(t)$ ——称为特征线。

在河水流经时间为t（由 $0 \longrightarrow t$）时

$$
x(t) = ut \tag{2·30}
$$

在$x(t) = 0$， $c = c_0$时，

$$
c[x(t)] = c_0 \exp[-k_1 x(t)/u] \tag{2·31}
$$

由上述方程可知，只要已知初始浓度（$x = 0$，$c = c_0$时），即可求得该水团流到下游某地点x的时间与污染物浓度。

（三）瞬时突发性排污时的一维河流水质基本方程解

为便于求解，可将瞬时突发性排污模拟为以下的情况：在河段的起始断面（$x = 0$，$t = 0$）上，把一个质量为W的污染物（如1 kg染料示踪剂），瞬时内投放于流量为Q的河水中，从而在$x = 0$处，形成一个平面污染源。瞬时排放的污染物可以用一个以短时间Δt（$\Delta t \to 0$）为等比指标的δ函数来表达。即相同量的平面污染源，W/Q，以不同的时间间隔（如Δt，$\dfrac{\Delta t}{2}$，

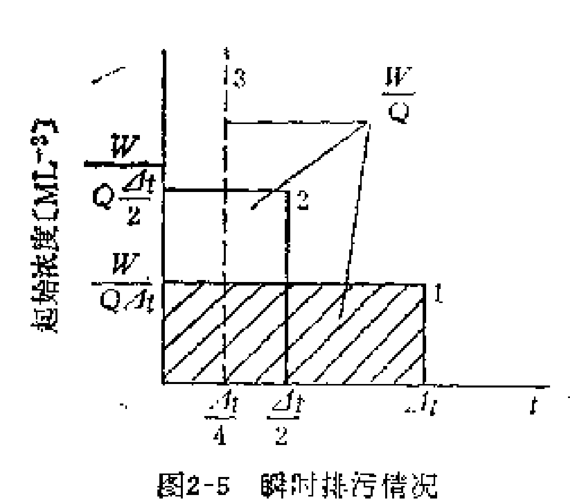


图2-5　瞬时排污情况

$\frac{\Delta t}{4}$ ···）来投放的。（如图2-5所示）。其投放负荷为 $\frac{W}{Q}$，其量纲为〔$ML^{-3}T^{-1}$〕，其起始浓度为 $\frac{W}{Q}\delta(t)$，而排放总量则为 $\int \frac{W}{Q}\delta(t)\,dt = \frac{W}{Q}$。（相当于图2-5中1，2，3的矩形面积均等于 W/Q）。δ 函数称为德耳塔函数，具有 $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(t)\,dt = 1.0$ 的特性。

这样我们可以在以下的初始条件和边界条件下

$$c(x, o) = 0, \quad c(o, t) = \frac{W}{Q}\delta(t)$$

$$c(\infty, t) = 0$$

来解

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} = E\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - k_1 c \tag{2·32}$$

首先利用变量 t 的拉普拉斯（Laplace）变换使原偏微分方程（2.32）转变为含S变量的关于 x 的常微分方程。即以

$$L[c(x,t)] = \int_0^{\infty} e^{-st} c(x,t)\,dt = c^L(x,s)$$

式中：　s——拉普拉斯变量。

$$sc^L + u\frac{dc^L}{dx} = E\frac{d^2c^L}{dx^2} - k_1 c^L \tag{2·33}$$

改写为

$$E\frac{d^2c^L}{dx^2} - u\frac{dc^L}{dx} - (s + k_1)c^L = 0$$

其特征多项式为

$$\lambda^2 - \frac{u}{E}\lambda - \frac{s + k_1}{E} = 0$$

特征值为

$$\lambda_{1,2} = \frac{u}{2E}\left(1 \pm \frac{2\sqrt{E}}{u}\sqrt{\frac{u^2}{4E} + k_1 + s}\right)$$

其通解为 $c^L = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x}$

式中： A、B——为待定常数。

由于λ_1反映的是不可行解，故$A = 0$由初始条件和边界条件为

$$c^L(0,s) = \int_0^{\infty} e^{-St}\frac{W}{Q}\delta(t)\,dt = \frac{W}{Q}e^{-St}$$

$$= \frac{W}{Q}e^{-S\cdot 0} = \frac{W}{Q}$$

$$c^L = Be^{\lambda_2 \cdot 0} = B = \frac{W}{Q}$$

得

$$\begin{cases} c^L = \dfrac{W}{Q}e^{\lambda_2 x} \\ \lambda_2 = \dfrac{u}{2E}\left(1 - \dfrac{2\sqrt{E}}{u}\sqrt{\dfrac{u_2}{4E} + k_1 + s}\right) \end{cases} \quad (2\cdot 34)$$

再利用拉普拉斯的逆变换公式

$$L^{-1}\left[\exp\left(-y\sqrt{s+z}\right)\right] = \frac{y\exp(-zt)}{2\sqrt{\pi}\,t^{1.5}}\exp\left(-\frac{y^2}{4t}\right)$$

式中：$y = \dfrac{x}{\sqrt{E}}$； $z = \dfrac{u^2}{4E} + k_1$

经拉普拉斯逆变换可得

$$c(x,t) = \frac{W}{A\sqrt{4E}}\exp(-k_1 t)\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right] \quad (2\cdot 35)$$

式中：$c(x,t)$——瞬时突然排污引起的污染物浓度的时—空分布，〔ML^{-3}〕；

W——瞬时投放的污染物质量，〔M〕；

A——河流断面积，〔L^2〕；

E——纵向弥散系数，〔L^2T^{-1}〕；

Q——河流流量，〔L^3T^{-1}〕；

k_1——污染物衰减速率系数，〔T^{-1}〕；

u——河流平均速度，〔LT^{-1}〕。

对难降解污染物可表达为

$$c(x,t)=\frac{W}{A\sqrt{4\pi Et}}\exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right) \qquad (2\cdot36)$$

式中： $\frac{W}{A}$——单位面积上投放的污染物量，〔ML^{-2}〕。

方程（2·36），表示出在不同位置坐标处，污染物浓度随时间的分布，它是正态分布曲线。流动距离（或流动时间）越大，污染物浓度越小，弥散的距离越宽；弥散系数越大，相同坐标距离处的浓度越小，弥散的距离也越宽。

弥散的宽度可以用均方差σ^2来衡量。

$$\sigma^2=2Et \qquad (2\cdot37)$$

图2-6反映了正态分布的许多特征。在4σ的范围内已经包括了污染物总量的95%，故可以用4σ或$4\sqrt{2Et}$来估计弥散的宽度。如果在时间t_1时，已知浓度分布为σ_1^2，则时间t_2时的浓度分布σ_2^2可写成：

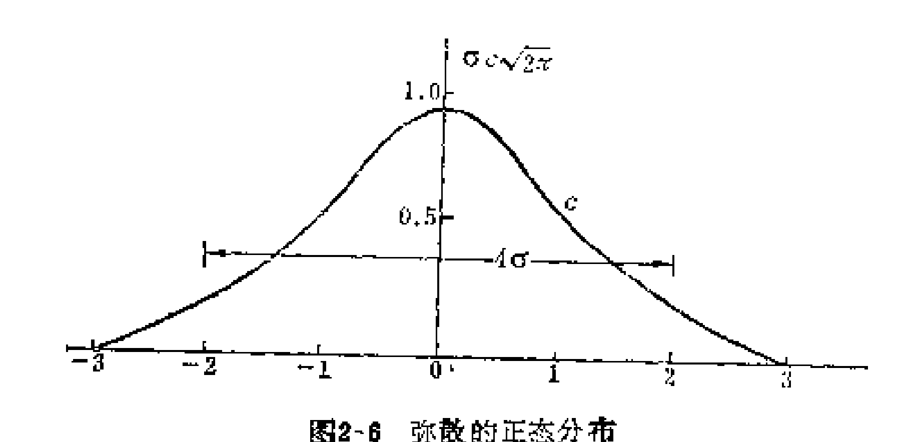


图2-6 弥散的正态分布

$$\sigma_2^2=\sigma_1^2+2E(t_2-t_1) \qquad (2\cdot38)$$

对式2·37求导可得

$$\frac{d\sigma^2}{dt}=2E \qquad (2\cdot39)$$

实用上可用上式估算弥散系数值。

（四）阶梯状连续集中排污的一维河流水质基本方程解

对于始终以W质量的污染物连续投放于起始断面($x=0$处)面积A上的情况，可以看作为等于在每个时间增量Δt后，连续不断地投放各单个平面污染源，$\left(\frac{W}{A}\right)$。在全部时间内连续投放所形成的污染物浓度的总效果，是各单个投放所形成的浓度的线性叠加之和。它的解析解可写成：

$$c(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{W}{A\sqrt{4\pi E(t-\tau)}}\exp\left\{-\frac{[x-u(t-\tau)]^2}{4E(t-\tau)}-k_1(t\tau)\right\}d\tau \tag{2·40}$$

式中：τ——单个投放的时间。

式(2·40)只有在特殊条件下才有解析解。

当污染物是阶梯状连续集中排污的情况时，即在$t=0$时，在$x=0$处，起始断面上浓度突然增加到$\frac{W}{Q}\delta(t)$，此后保持不变。对此可写成以下的解析解表达式

$$c(x,t)=\int_{0}^{t}\frac{W}{A\sqrt{4\pi E(t-\tau)}}\exp\left\{-\frac{[x-u(t-\tau)]^2}{4E(t-\tau)}-k_1(t-\tau)\right\}d\tau \tag{2·41}$$

在初始条件和边界条件为

$$c(o,t)=\begin{cases}c_0=\frac{W}{Q}\delta(t) & 0\leqslant t\leqslant\tau\\ 0 & t>\tau\end{cases}$$

$$c(x,0)=0 \qquad t=0$$

$$c(\infty,t)=0$$

利用拉氏变换法可求得以“误差函数”和“余误差函数”形式表达的解析解

$$\frac{c(x,t)}{c_0}=\frac{1}{2}\Big(\exp\left(\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\cdot\frac{x}{\sqrt{E}}\right)\cdot\operatorname{erf}\Big(\frac{x}{2\sqrt{Et}}+\sqrt{t}\cdot\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\Big)+\exp\Big(-\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\cdot$$

$$\cdot\frac{x}{\sqrt{E}}\Big)\cdot \mathrm{erf\ c}\Big(\frac{x}{2\sqrt{Et}}-\sqrt{t}\cdot\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\Big)\Big]$$

$$\cdot\ \exp\Big(\frac{ux}{2E}\Big)-\frac{1}{2}\Big[\exp\Big(\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\cdot\frac{x}{\sqrt{E}}\Big)\cdot$$

$$\cdot\ \mathrm{erf\ c}\Big(\frac{x}{2\sqrt{E(t-\tau)}}+\sqrt{t-\tau}\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\Big)+$$

$$+\exp\Big(-\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\cdot\frac{x}{\sqrt{E}}\Big)\cdot\mathrm{erf\ c}\Big(\frac{x}{2\sqrt{E\ (t-\tau)}}$$

$$-\sqrt{t-\tau}\sqrt{\frac{u^2}{4E}+k_1}\Big)\Big]\cdot\exp\Big(\frac{ux}{2E}\Big)\cdot\theta\ (t-\tau) \tag{2·42}$$

式中：$c_0=\frac{W}{Q}\delta(t)$，〔ML^{-3}〕；

τ——各瞬时源恒定释放的有限时段，〔T〕；

k_1——污染物衰减系数，〔T^{-1}〕；

E——弥散系数，〔L^2T^{-1}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

$$\theta\ (t-\tau)=\begin{cases}0 & t\leq\tau\\ 1 & t>t\end{cases}$$

$\mathrm{erfc}\ (\varepsilon)=1-\mathrm{erf}\ (\varepsilon)$　　　（余误差函数）

$\mathrm{erf}(\varepsilon)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\varepsilon}e^{-t^2}dt$。　　　（误差函数）

对难降解的污染物，方程（2·42）可写为

$$c\ (x,t)=c_0\Big\{\frac{1}{2}\Big[\exp\Big(\frac{ux}{2E}\Big)\cdot\mathrm{erf}c\Big(\frac{x+ut}{\sqrt{4Et}}\Big)+\exp\Big(\frac{ux}{2E}\Big)$$

$$\cdot\mathrm{erf}\,c\Big(\frac{x-ut}{\sqrt{4Et}}\Big)\Big]\cdot\exp\Big(\frac{ux}{2E}\Big)-\frac{1}{2}\Big[\exp\Big(\frac{ux}{2E}\Big)$$

$$\cdot\mathrm{erf}\,c\Big(\frac{x+u(t-\tau)}{\sqrt{4E(t-\tau)}}\Big)+\exp\Big(-\frac{ux}{2E}\Big)\cdot$$

$$\cdot \text{erfc}\left(\frac{x-u(t-\tau)}{\sqrt{4E(t-\tau)}}\right)\Big]\cdot\exp\left(\frac{ux}{2E}\right)\cdot\theta(t-\tau)\Big\} \tag{2·43}$$

式中符号同前。

三 二维稳态河流水质扩散模型基本方程及其解析解

在一个河段的起始断面，稳态排入含难降解污染物的污水，在其横断面方向（y）的浓度分布以$c=f(y)$表示。假定污染物排入后在水深方向（z）上很快均匀混合。由于$\partial c/\partial t=0$，$\partial c/\partial z=0$，则河流的二维稳态水质模型的基本方程为：

$$\bar{u}\frac{\partial c}{\partial x}=D_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+D_y\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \tag{2·44}$$

式中：c——某点$(x,\ y)$处河水的污染物时平均浓度，〔ML^{-3}〕；

$\bar{u}$——河流纵向（x方向）的断面平均流速，〔LT^{-1}〕；

D_x, D_y——河流纵向和河流横向扩散系数，〔L^2T^{-1}〕。

由于上式中等式右边的第一项与平流项相比是很小的，忽略此项可得

$$\bar{u}\frac{\partial c}{\partial x}=D_y\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \tag{2·45}$$

（一） 无限水体的二维稳态点源排放的水质模型

对上述二维稳态点源排放的水质模型基本方程，在$x=0$，$c=f(y)$的初始断面条件下进行积分求解，可得到无限定边界条件下水域的二维稳态水质模型

$$c(x,y)=\frac{W}{h\bar{u}\sqrt{4\pi D_y t}}\exp\left[-\frac{(y)^2}{4D_y t}\right] \tag{2·46}$$

或 $$c(x,y)=\frac{W}{h\sqrt{4\pi D_y\bar{u}x}}\exp\left(-\frac{\bar{u}y^2}{4D_y x}\right) \tag{2·47}$$

式中：W——$x=0$断面上排放的污染物总量，〔M〕；

h——水深，〔L〕；

$\bar{u}$——河流纵向（x方向）的断面平均流速，L〔T^{-1}〕；

D_y——横向扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

x, y——纵向和横向坐标距离，〔L〕；

t——纵向流动时间，〔T〕；

c——x, y坐标处的污染物浓度，〔ML^{-3}〕。

上式是随x（或t）而变化的正态分布表达式，随着流动时间的不同（在不同的坐标x处）可以画成该断面处在x方向和y方向的浓度分布曲线。表征x方向扩散宽度的均方差$\sigma^2 = 2D_yt$。扩散宽度为4σ或$4\sqrt{2D_yt}$。

（二） 边界限制下的二维河流稳态点源排放水质模型

实际河流並非是无限水域，而是具有两岸与河底。污染物的扩散受到边界的限制，在边界上扩散的物质有两种可能，一种是扩散物质被边界吸收而粘结在边界上，另一种是遇到固体边界就反射回来，称为完全反射。在完全反射与完全吸收之间，还有中间状态。反射的情况与边界的性质有关，又与扩散物质的性质有关。从最不利来考虑，取完全反射。

1． 边界反射

设有一污染源向边界扩散（只考虑一边反射），从源到边界距离为b'，污染物的扩散距离为$y = b'$，遇到固体边界反射回来。

引入“镜中映象的概念”。设想边界处为一镜子，其后面有一个与实际源强度相同、距离相同（b'）的虚拟反射源点，则真源与象源的坐标距离应为$2b'$。

污水扩散引起的河水浓度，应为实际源与假想源所引起的浓度之和　　$c(x,y) = c(x,y) + c'(x,y)$

真　源　　　　象源

$$c(x,y) = \frac{W}{hu\sqrt{4\pi D_yt}}\left\{\exp\left(\frac{y^2}{4D_yt}\right) + \exp\left[\frac{-(2b'-y)^2}{4D_yt}\right]\right\} \quad (2\text{·}48)$$

将$y=b'$代入上式则得

$$c(x,y)=\frac{2W}{hu\sqrt{4\pi D_y t}}\left\{\exp\left(-\frac{y^2}{4D_y t}\right)\right\} \tag{2·49}$$

可见，对于完全反射的边界，在边界处的浓度是没有反射时的两倍。

2、两边反射

（1）中心排污

对两边都有边界，源点位于河流中心的情况（如图2-7）。污染物质向两岸扩散，就有两个像源。两个像源到中心的距离为$-2b'$和$+2b'$。两岸的浓度都是真源浓度的两倍。

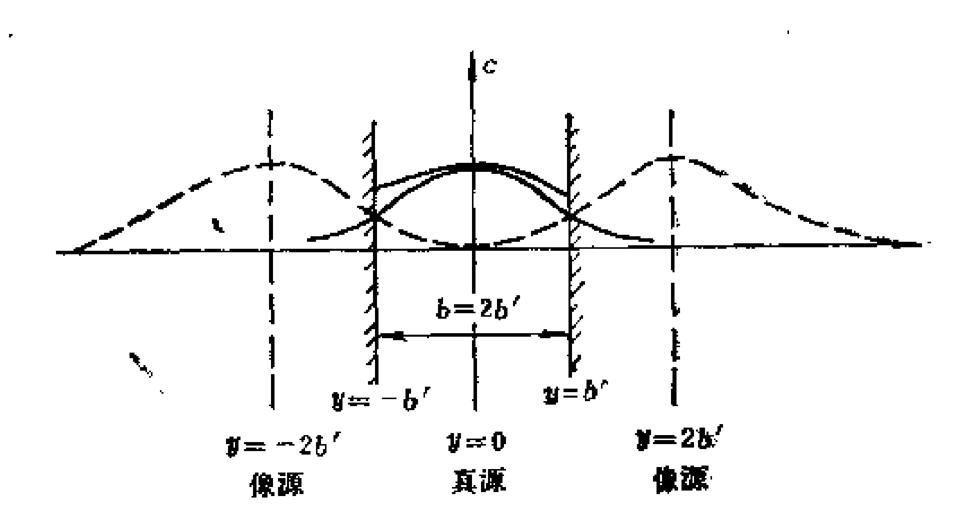


图2-7 两边反射时的污染物扩散示意图

但是如果从一个岸边（如右岸）第一次反射的浓度场遇到对岸（左岸）又产生反射，而形成第二次反射，这样逐次反射以至无穷。因而有无数的像源点，它们到河中心$y=0$的距离，依次为$-2b'$，$-4b'$，$-6b'$，……$+2b'$，$+4b'$，$+6b'$，……。把各次反射的浓度总加起来，可得

$$c(x,y)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{W}{h\bar{u}\sqrt{4\pi D_y t}}\exp\left(-\frac{(2nb'-y)^2}{4D_y t}\right)$$

在实际问题中，因为河流很宽（b比较大），一般只要考虑一两次反射已足够，（即$n = 1-2$）。

考虑岸边一次反射时的二维稳态河流中心点源排污水质模型为

$$c(x,y)=\frac{W}{h\bar{u}\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\left\{\exp\left(-\frac{\bar{u}y^2}{4D_yx}\right)+\exp\left[-\frac{\bar{u}(b-y)^2}{4D_yx}\right]+\exp\left[-\frac{\bar{u}(b+y)^2}{4D_yx}\right]\right\} \qquad (2\cdot50)$$

（2）岸边排污

当岸边排污源位于河流纵向坐标$x=0$处，河宽为b时，考虑河岸一次反射时的二维稳态河流岸边排污水质模型为

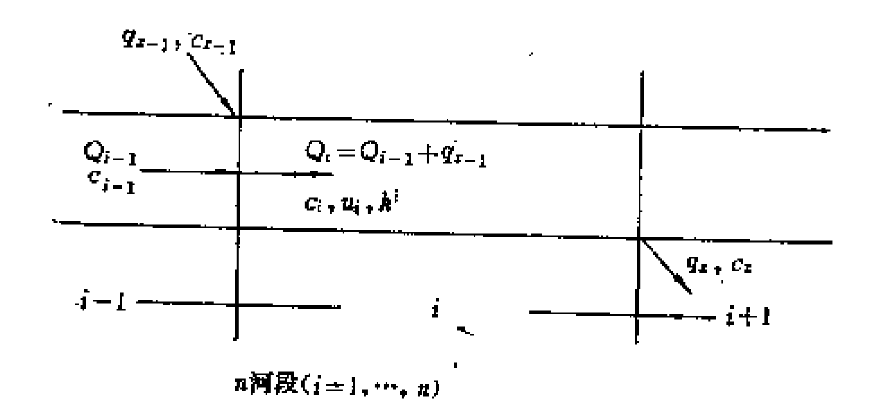
$$c(x,y)=\frac{W}{h\bar{u}\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\left\{\exp\left(-\frac{\bar{u}y^2}{4D_yx}\right)+\exp\left[-\frac{\bar{u}(2b-y)^2}{4D_yx}\right]\right\} \qquad (2\cdot51)$$

第三节　河流水质模型

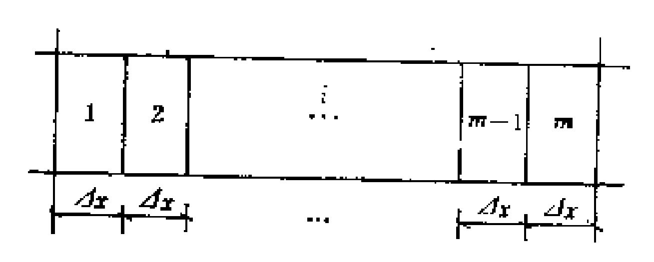
一　槽列（零维）模型

将河流模拟为一系列串联的连续快速搅拌反应水槽（即串联的零维完全混合反应器），又称为 CFSTR 模型（continuously fast stirred tank reactor model）。其结构见图2-8。

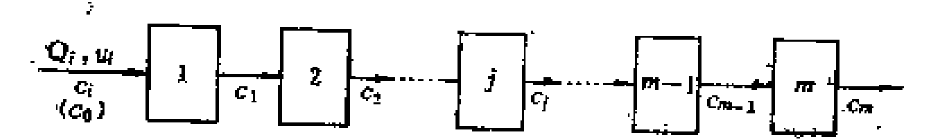
对源漏项仅为衰减反应项（包括降解或蜕变反应）的零维河流水质模型基本方程为



n河段（$i=1, \cdots, n$）



第i河段m个单元（$j=1, \cdots, m$）



m个串联完全混合反应器

图2-8 零维河流水质模型结构

稳态条件，$\frac{dc}{dt}=0$ 可得第 i 河段零维河流稳态水质模型积分解为

$$c = \frac{Qc_0}{Q+kV} = \frac{c_0}{1+k\left(\frac{V}{Q}\right)} \tag{2·52}$$

第i河段第j单元（$j=1$，$\cdots$，m）的零维稳态水质模型为

$$c_j = c_0\left(\frac{1}{1+k_i\frac{\Delta x}{u}}\right)^j \tag{2·53}$$

式中：

$$c_0=\frac{Q_{i-1}C_{i-1}+q_{x-1}c_{x-1}}{Q_{i-1}+q_{x-1}};$$

k_i——第i河段污染物衰减速率系数，〔T^{-1}〕；
Q_{i-1}——第i河段上游流量，〔L^3T^{-1}〕；
c_{i-1}——第i河段上游污染物浓度，〔ML^3〕；
q_{x-1}——第i河段旁侧入流简化为节点流量，〔L^3T^{-1}〕；
c_{x-1}——第i河段节点输入的污染物浓度，〔ML^{-3}〕；
Δx——第i河段分为m单元，各单元的距离，〔L〕；
u——第i河段平均流速，〔LT^{-1}〕；
V——河段水的体积，〔L^3〕；

【例题2-1】

一均匀河段长50km稳定排放含酚废水$q=1\ m^3/s$，$c'=200$ mg/l，上游河水流量$Q=9\ m^3/s$，$c=0$，河水的平均流速$u=40km/d$，酚的衰减速率系数$k=2\ d^{-1}$。求由河段排放口以下1 km，2 km，5 km，10km，50km处的河水含酚浓度。

解：河段起始断面河水含酚浓度为

$$c_0=\frac{(9)(0)+(1)(200)}{(9)+(1)}=20mg/l$$

将河段分为50个单元，每个单元的距离为1 km。（$\Delta x=1$）则

$$c_1=20\left(\frac{1}{1+2\frac{1}{40}}\right)^1=\frac{20}{(1+0.05)}=19.048\quad mg/l$$

$$c_2=\frac{20}{(1+0.05)^2}=18.141\quad mg/l$$

$$c_5=\frac{20}{(1+0.05)^5}=15.671\quad mg/l$$

$$c_{10}=\frac{20}{(1+0.05)^{10}}=12.278 \quad mg/l$$

$$c_{50}=\frac{20}{(1+0.05)^{50}}= 1.744 \quad mg/l$$

二 一维河流的单组份水质模型

（一）一维河流单组份稳态水质模型

当河流中河段均匀、定常连续排污和水文条件稳定时，该河段的断面积 A、平均流速 u 以及污染物的输入量W和纵向弥散系数 E都不随时间而变化。此时，河流断面污染物浓度 c 是稳定而不随时间变化的，即 $\frac{\partial c}{\partial t}=0$ （如图2-9）

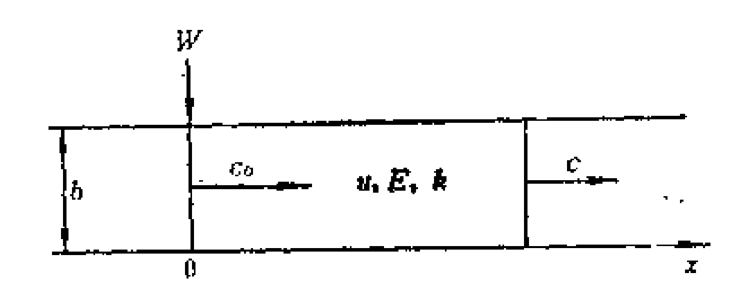


图2-9 一维稳态河流（单组份）示意图

一维河流的稳态水质模型基本方程为：

$$u\frac{\partial c}{\partial x}=E\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-kc \qquad (2\cdot54)$$

当初始条件和边界条件（如图 2－9）为$x=0$时，$c=c_0$；$x=\infty$，$c=0$。可解得以下积分方程

$$c=c_0\ \exp\left[\frac{u}{2E}\left(1-\sqrt{1+\frac{4kE}{u^2}}\right)x\right] \qquad (2\cdot55)$$

式中： c——x处的河水污染物浓度，〔ML^{-3}〕；

c_0——$x=0$处的河水污染物浓度，〔ML^{-3}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

k——污染物的衰减系数，〔T^{-1}〕；

E——弥散系数，〔L^2T^{-1}〕。

【例题2-2】

一均匀河段稳定排放含酚废水，起始断面河水含挥发酚浓度为$c_0=20mg/l$，河水的平均流速$u=40km/d$，弥散系数$E=1km^2/d$（$11.57m^2/s$），酚的衰减速率系数为$k=2d^{-1}$。求$x=50km$处的河水含酚浓度c。

解： $$c=c_0\exp\left[\frac{u}{2E}\left(1-\sqrt{1+\frac{4kE}{u^2}}\right)x\right]$$

$$=20\exp\left[\frac{40}{(2)(1)}\left(1-\sqrt{1+\frac{(4)(2)(1)}{(40)(40)}}\right)50\right]$$

$$=20\exp[1000(1-\sqrt{1.005})]=20e^{-2.4968}$$

$$=1.647\quad mg/l$$

如$E=10km^2/d$，则

$$c=20\exp\left[\frac{40}{(2)(10)}\left(1-\sqrt{1+\frac{(4)(2)(10)}{(40)(40)}}\right)50\right]$$

$$=20e^{-2.4696}=1.693\quad mg/l$$

（二） 忽略弥散的一维稳态单组份水质模型

对于一般不受潮汐影响的、连续排污的稳态河流，往往可以忽略纵向弥散作用。此时一维河流的稳态水质模型为：

$$\begin{cases}c=c_0e^{-kt}\\x=ut\end{cases}\tag{2·56}$$

式中： c——x处河水污染物的浓度，〔ML^{-3}〕；

c_0——$x=0$处河水污染物的浓度，〔ML^{-3}〕；

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

t——河水由$x=0$（$t=0$）处下流的时间，〔T〕。

上式表达的关系可用图2-10来反映。从图看出，若已知c_0，u，k的资料，利用式（2·56）即可求得t时河水流到下游的位置及其断面的平均污染物浓度。

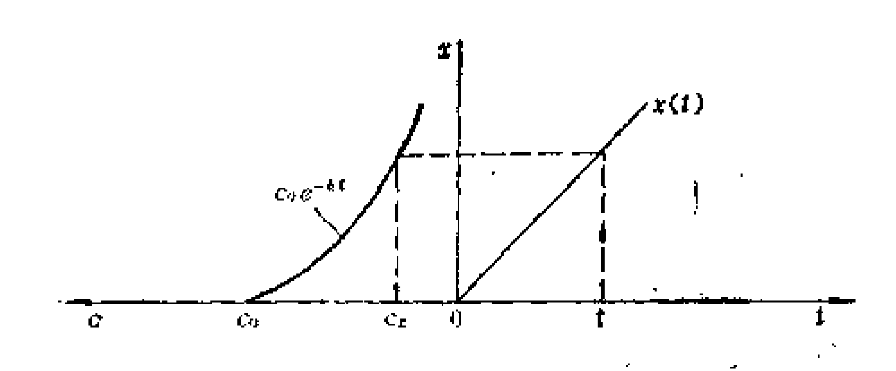


图2-10 由已知c_0,u,k值，确定一维稳态河流（忽略弥散）污染物流动位置和浓度

【例题2-3】 用上题的数据，计算忽略弥散作用时$x=50$km处河水的含酚浓度c。

$$c=20e^{-2\cdot 50/40}=1.6417\text{mg/l}$$

（三）一维河流突发性排污的水质模型

假定排污口（$x=0$），在很短的Δt时间内，瞬时突发性地排放质量为W的污染物，它与流量为Q的河水迅速均匀混合，在$x=0$断面处形成一个平面（面积为A）污染源。（如图2-11）

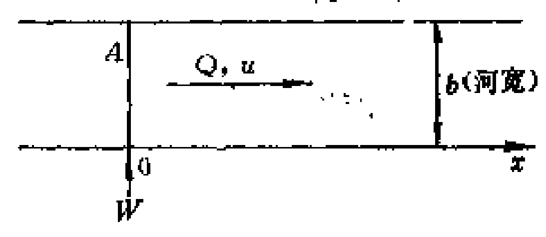


图2—11 一维河流突发性排污

在上述条件下，在不同流动距离、不同时间时河流各断面的水质可用下面的关系式来表达其时一空的变化。

$$c(x,t)=c_0\frac{u}{\sqrt{4\pi Et}}\exp(-kt)\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right]\quad(2\cdot57)$$

或 $$c(x,t)=\frac{W}{A\sqrt{4\pi Et}}\exp(-kt)\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right] \quad (2\text{-}58)$$

式中：c——x处t时河水断面污染物浓度，$[ML^{-3}]$；

c_0——$x=0$处，瞬时投放的平面污染源浓度，$[ML^{-3}T]$，$c_0=W/Q$；

W——瞬时排放的污染物总量，$[M]$；

Q——河水流量，$[L^3T^{-1}]$；

A——河流断面积，$[L^2]$；

u——平均流速，$[LT^{-1}]$；

E——弥散系数，$[L^2T^{-1}]$；

k——污染物衰减速率系数，$[T^{-1}]$。

对惰性污染物（如示踪剂）$k=0$，当$t=0$，$x=0$处排污时，各河流下游断面的污染物浓度表达式为

$$c(x,t)=c_0\frac{u}{\sqrt{4\pi Et}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right] \quad (2\text{-}59)$$

或 $$c(x,t)=\frac{W}{A\sqrt{4\pi Et}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4Et}\right] \quad (2\text{-}60)$$

【例题2-4】

某河始端瞬时投放10kg示踪剂，河流流速为0.5m/s，弥散系数为50m²/s，河流断面积为20m²。

求：河流下游500m处河水示踪剂浓度随时间的变化曲线（$c-t$曲线）。

解：投放点（$x=0$）处的投放浓度

$$c_0=\frac{W}{Q}=\frac{(10)(1000)}{(0.5)(20)}=1000 \quad \text{mg}\cdot\text{s/l}$$

$x=500$m处河水中示踪剂浓度

$$c(500,t)=(1000)\frac{(0.5)}{\sqrt{4\pi(50)(t)}}\exp\left[-\frac{(500-0.5t)^2}{(4)(50)(t)}\right]$$

$$= \frac{199.474}{\sqrt{t}} \exp\left[-\frac{(500-0.5t)^2}{200t} \right] \quad \text{mg/l}$$

取不同的时间t，可计算得以下结果：

t(min)	2	6	10	12	14	16	20	24	36	40
t(S)	120	360	600	720	840	960	1200	1440	2160	2400
c(mg/l)	0.6×10^{-8}	0.254	0.583	0.649	0.663	0.642	0.552	0.444	0.197	0.147

据此可以画出如图2-12的$c-t$变化曲线。$x=500$m处，当$t \doteq 14$ min时河水的示踪剂浓度最高，约为$c=0.663$mg/l（平均值$\bar{t}=\frac{500}{0.5}=1000\text{s}\doteq16.7\text{min}$）。

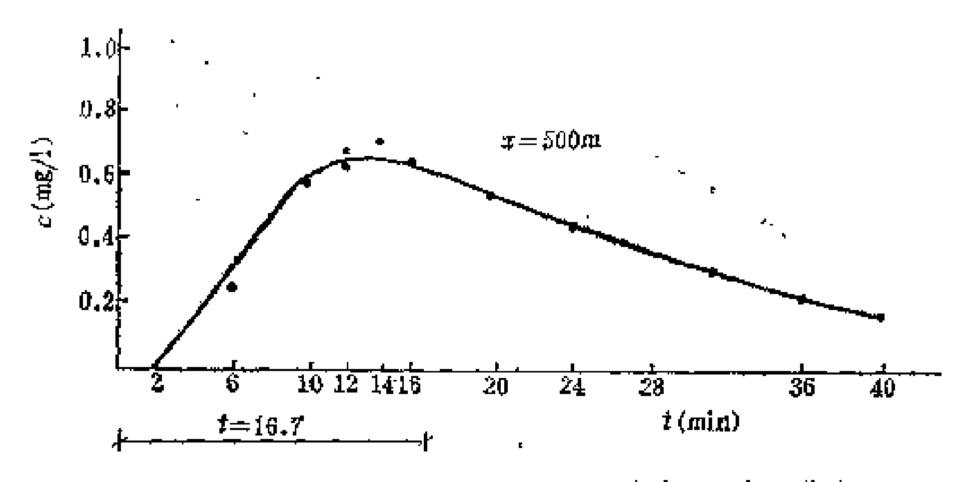


图2-12 500m处河水中示踪剂浓度随时间的变化曲线

【例题2-5】

某河始端瞬时投放浓度为1 Ci/l的放射性含铅（Pb^{212}）废水378.5 l。Pb^{212}的半衰期为10.6h（衰减变化按一级动力学公式进行）。河流断面积为13.86m^2，平均流速为0.53m/s，弥散系数为$E=22\text{m}^2/\text{s}$。

求：（1）下游8 km处河水放射性浓度随时间的分布曲线；（2）若河水中Pb^{212}的最高允许浓度为1×10^{-6}Ci/l，问下游该处那一段时间内不能用水？

解：Pb^{212}的半衰期为10.6h。由$\frac{c}{c_0} = e^{-(k)(10.6)} = \frac{1}{2}$，可计算得$k = 0.065h^{-1}$。

$x = 8000$m处河水Pb^{212}浓度为

$$c(8000,t) = \frac{(1)\ (378.5)}{(15.86)\sqrt{4\pi(22)(3600)(t)}}\exp(-0.065t)$$

$$\cdot\exp\left\{-\frac{[x-(0.53)(3600)t]^2}{(4)(22)\ (3600)t}\right\} = \frac{0.02738}{\sqrt{t}}$$

$$\exp(-0.065t)\exp\left[-\frac{(8000-1908t)^2}{316800t}\right]\ Ci/m^3$$

由不同的流动时间可算得以下结果

t(h)	3.2	3.6	4.0	4.2	4.6	5.0	5.4
c	3.6×10^{-4}	3.72×10^{-3}	9.49×10^{-3}	0.01	6.26×10^{-3}	1.98×10^{-3}	3.73×10^{-4}

从而可画出如图2-13所示的变化曲线

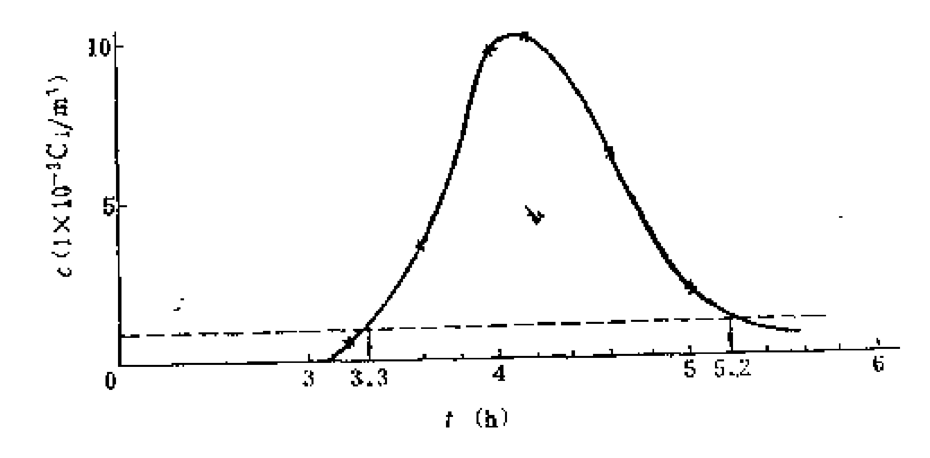


图2-13　8000m处河水的c-t曲线

答：当河水Pb^{212}的最大容许浓度为1×60^{-6}Ci/l时，不安全用水时间为3.3—5.2小时（共1.9小时）。最大浓度在4.2小时，$c_{max} = 1\times10^{-5}$Ci/l。

三 斯特里特-菲尔普斯（Streeter-Phelps）BOD-DO模型

（一）S-P方程

斯特里特-菲尔普斯对一维稳态河流的BOD-DO耦合模型的基本方程简称“S-P”方程采用

$$\begin{cases} u\dfrac{\partial L}{\partial x} = E\dfrac{\partial^2 L}{\partial x^2} - k_1 L \\ u\dfrac{\partial O}{\partial x} = E\dfrac{\partial^2 O}{\partial x^2} - k_1 L + k_2(O_s - O) \end{cases} \qquad (2\cdot61)$$

在$L(x=0)=L_0$，$O(x=0)=O_0$的初值条件下，求其积分解。得到以下的S-P模型

1、考虑弥散时

$$\begin{cases} L = L_0 e^{-\beta_1 x} \\ O = O_s - (O_s - O_0)e^{\beta_2 x} + \dfrac{k_1 L_0}{k_1 - k_2}(e^{\beta_1 x} - e^{\beta_2 x}) \end{cases} \qquad (2\cdot62)$$

式中：

$$\beta_1 = \frac{u}{2E}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{4Ek_1}{u^2}}\right); \qquad (2\cdot63)$$

$$\beta_2 = \frac{u}{2E}\left(1 - \sqrt{1 + \frac{4Ek_2}{u^2}}\right)。 \qquad (2\cdot64)$$

2、忽略弥散时

$$\begin{cases} L = L_0 e^{-k_1 x/u} \\ O = O_s - (O_s - O_0)e^{-k_2 x/u} + \dfrac{k_1 L_0}{k_1 - k_2}(e^{-k_1 x/u} - e^{-k_2 x/u}) \end{cases}$$

或

$$D = D_0 e^{-k_2 x/u} - \frac{k_1 L_0}{k_1 - k_2}(e^{-k_1 x/u} - e^{-k_2 x/u}) \qquad (2\cdot65)$$

式中：L, L_0——$x=x$和$x=0$处河水BOD浓度，〔ML^{-3}〕；

O, O_0——$x=x$和$x=0$处河水溶解氧的浓度，〔ML^{-3}〕；

D, D_0——$x=x$和$x=0$处河水溶解氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

x——离排污口（$x=0$）的河水流动距离，〔L〕；

u——河水平均流速，〔LT^{-1}〕；

k_1——BOD的衰减系数，〔T^{-1}〕；

k_2——河水复氧系数，〔T^{-1}〕；

E——河流弥散系数，〔L^2T^{-1}〕；

O_S——河水在某温度时的饱和溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕。

（二）用S-P方程推求临界氧亏和临界距离

对式（2·65）求导，并令$dD/dx=0$，可得

临界距离

$$x_c=\frac{u}{k_2-k_1}\ln\left\{\frac{k_2}{k_1}\left[1-\left(\frac{k_2}{k_1}-1\right)\left(\frac{D_0}{L_0}\right)\right]\right\} \quad (2·66)$$

临界氧亏

$$D_c=\left(D_0+\frac{L_0}{1-f}\right)\left\{f\left[1-(f-1)\left(\frac{D_0}{L_0}\right)\right]\right\}^{\frac{f}{1-f}}-\frac{L_0}{1-f}\left\{f\left[1-(f-1)\left(\frac{D_0}{L_0}\right)\right]\right\}^{\frac{1}{1-f}} \quad (2·67)$$

临界溶解氧

$$O_c=O_s-\left(O_s-O_0+\frac{L_0}{1-f}\right)\left\{f\left[1-(f-1)\left(\frac{O_s-O_0}{L_0}\right)\right]\right\}^{\frac{f}{1-f}}+\frac{L_0}{1-f}\left\{f\left[1-(f-1)\left(\frac{O_s-O_0}{L_0}\right)\right]\right\}^{\frac{1}{1-f}} \quad (2·68)$$

式中：$f=\frac{k_2}{k_1}$，自净系数，为复氧系数与耗氧系数之比，反映水中溶解氧自净作用的快慢。

（三）S-P方程各参数的灵敏度分析

【例题2-6】

一均匀河段稳定排放BOD_5，河水平均流速$u=48km/d$，水温$T=20°C$，始端河水BOD_5和DO浓度分别为$L_0=20mg/l$，$O_0=8mg/l$，$k_1=0.505d^{-1}$，$k_2=1.01d^{-1}$。用上述数据对S-P方程中各

参数的灵敏度作出分析。

解：由上述条件用式（2·62）可计算得到初设条件下的BOD-DO分布值，然后改变某参数值（±20%），再计算得到新的BOD-DO分布值。对比前后两种条件下的偏差百分数，据此评价模型各参数对它的灵敏度。

1、各参数对临界溶解氧O_c的灵敏度

初设条件下

$$O_s=\frac{468}{31.6+T}=\frac{468}{31.6+20}=9.0698$$

$$O_c=9.0698-\frac{0.505\times 20}{1.01}\left\{\frac{1.01}{0.505}\left[1-\left(\frac{1.01}{0.505}-1\right)\left(\frac{9.0698-8}{20}\right)\right]\right\}^{1/1-\frac{1}{0}\cdot\frac{0.1}{0.5}}=3.79\quad mg/l$$

新设条件下O_c及其与初设条件的偏差见表2-3。

由表2-3所得偏差百分数可以看出，各参数对临界溶解氧O_c的灵敏度大小的次序为

$$L_0>k_1, k_2>O_0$$

O_c值与流速u无关，u的增加只使临界点往下移动，但并不影响O_c的数值。

2、各参数对$x=50$km处BOD_5的灵敏度

初设条件下

$$L_{50}=20e^{-(0.505)(50)/(48)}=11.82\ mg/l$$

新条件下的变化见表2-4。由表可知对50km处BOD_5反映的灵敏度大小次序为

$$L_0>u,\ k_1$$

k_2和O_0对L_{50}不产生影响。这正是S-P模型的基本假设。

3、弥散系数对BOD-DO值的影响

计算E为0，0.5，5，50，500和5000km²/d时的BOD_5和DO值。其值当E为500km²/d以上时才有差别，E为50km²/d以下

表2-3　新设条件下O_e及其与初设条件的偏差

参　　数	k_1		k_2		O_0		L_0		u	
增减20%	−	+	−	+	−	+	−	+	−	+
新参数值	0.4	0.6	0.8	1.2	6.4	9.6	16	24	38.4	57.6
O_e(mg/l)	4.48	3.18	3.04	4.33	3.24	4.07	4.78	2.79	3.79	3.79
ΔO_c(mg/l)	+0.59	−0.61	−0.75	+0.54	−0.55	+0.28	+0.99	−1.0	0	0
偏差(%)	+15.57	−16.1	−19.79	+14.25	−14.51	+7.39	+26.1	−26.0	0	0
	②				③		①			

表2-4　新　条　件　下　的　变　化

参　　数	k_1		k_2		O_0		L_0		u	
增减20%	−	+	−	+	−	+	−	+	−	+
新加数值	0.4	0.6	0.8	1.2	6.4	9.6	16	24	38.4	57.6
L_{58}(mg/l)	13.18	10.11	11.82	11.82	11.82	11.82	9.5	14.26	10.43	12.96
ΔL_{58}(mg/l)	+1.3	−1.17	0	0	0	0	−2.38	+2.38	−1.45	+1.08
偏差(%)	+10.9	−9.85	0	0	0	0	−20.0	+20.0	−12.2	+9.09
	③						①		②	

时BOD-DO值均很接近。说明E比其它参数对BOD和DO的灵敏度都小，也说明一般稳态河流中可忽略弥散作用。

4、当河水始端浓度$L_0>36\text{mg/l}$时，上述初值条件下，临界溶解氧O_c将出现负值，这是违反实际情况的。说明斯特里特-菲尔普斯模型对BOD污染严重河流的水质计算是不能令人满意的，计算过程中需加以约束条件。如采用非稳态模型以数值解法来计算O_c就不会出现负值。

四　托马斯(Thomas)BOD-DO模型

对一维稳态河流，在斯特里特-菲尔普斯模型的基础上增加一项因悬浮物的沉淀与上浮所引起的BOD速率变化，k_3L。即采用以下的基本方程组（忽略弥散）

$$\begin{cases} u\dfrac{\partial L}{\partial x} = -(k_1+k_3)L \\ u\dfrac{\partial O}{\partial x} = -k_1L + k_2(O_s-O) \end{cases} \tag{2·69}$$

在$L(0)=L_0$，$O(0)=O_0$的初值条件下，得到托马斯模型的积分解

$$\begin{cases} L = L_0\exp\left[-\dfrac{(k_1+k_3)}{u}x\right] \\ O = O_s-(O_s-O_0)\exp\left[-\dfrac{k_2}{u}x\right]+\dfrac{k_1L_0}{k_1+k_3-k_2} \\ \qquad \left[\exp\left(-\dfrac{k_1+k_3}{u}x\right)-\exp\left(-\dfrac{k_2}{u}x\right)\right] \end{cases}$$

或

$$D = D_0\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)-\frac{k_1L_0}{k_1+k_3-k_2}\left[\exp\left(-\frac{k_1+k_3}{u}x\right) - \exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)\right] \tag{2·70}$$

式中：L, L_0——$x=x$和$x=0$处河水BOD浓度，$[ML^{-3}]$；

O, O_0——$x=x$和$x=0$处河水的溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

D, D_0——$x=x$和$x=0$处河水的氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

O_s——水温为T°C时的河水饱和溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

x——离排污口（$x=0$）的河水流动距离，〔L〕；

u——河水平均流速，〔LT^{-1}〕；

k_1——BOD衰减系数，〔T^{-1}〕；

k_2——河水复氧系数，〔T^{-1}〕；

k_3——BOD沉浮系数，〔T^{-1}〕。

【例题2-7】

某河始端流量45600m^3/d，$L_0=12mg/l$，$O_0=8.43mg/l$，水温为19.3°C。求：不同k_1、k_2、k_3值下河流下游不同流经时间t的氧亏值D。

解：$O_s=\dfrac{468}{31.6+19.3}=9.2mg/l$，$D_0=9.2-8.43=$

$=0.77mg/l$。由已知不同的k_1、k_2、k_3可计算得出河水流经时间各断面的溶解氧亏值 。（见表2-5）

表2-5 不同k_1、k_2、k_3下，河水不同流经时间的氧亏值

河水流经时间（日）	不同k_1、k_2、k_3条件下计算得到的氧亏值D（mg/l）			
	$k_1=0.12$ $k_2=0.12$ $k_3=0$	$k_1=0.12$ $k_2=0.24$ $k_3=0$	$k_1=0.12$ $k_2=0.12$ $k_3=0.6$	$k_1=0.12$ $k_2=0.12$ $k_3=-0.06$
0	0.8	0.8	0.8	0.8
0.5	2.1	1.9	2.0	2.1
1	3.2	2.6	2.8	3.2
2	4.2	3.2	3.6	4.7
3	4.7	3.1	3.7	5.5
4	4.6	2.7	3.4	5.9
5	4.4	2.3	3.0	6.0
6	4.0	1.9	2.6	5.9
8	3.0	1.2	1.8	5.3
10	2.1	0.7	1.1	4.5

【例题2-8】

某河段流量$Q=216\times10^4m^3/d$，流速$u=46km/d$，水温$T=13.6°C$，$k_1=0.94d^{-1}$，$k_2=1.82d^{-1}$，$k_3=-0.17d^{-1}$。河段始端排放$Q_1=10\times10^4m^3/d$废水，BOD_5为500mg/l，溶解氧为0 mg/l，上游河水BOD_5为0 mg/l，溶解氧为8.95mg/l。求该河段$x=6$ km处河水的BOD_5和氧亏值。

解：

河段始端混合河水的BOD_5和DO为

$$L_0=\frac{(216)(0)+(10)(500)}{216+10}=22.124mg/l$$

$$O_0=\frac{(216)(8.95)+(10)(0)}{216+10}=8.554mg/l$$

$$O_s=\frac{468}{31.6+13.6}=10.354mg/l$$

$$D_0=10.354-8.554=1.8mg/l$$

$$L=22.124\ \exp\left[-\frac{(0.94)-(0.17)}{(46)}(6)\right]$$

$$=22.124\ \exp(-0.1004)=20.01mg/l$$

$$D=1.8\ \exp\left[-\frac{(1.82)\ (6)}{(46)}\right]+\frac{(0.94)(22.124)}{(1.82)+(0.17)-(0.94)}$$

$$\left\{\exp(-0.1004)-\exp\left[-\frac{(1.82)\ (6)}{(46)}\right]\right\}$$

$$=3.714mg/l$$

五　多宾斯-坎普（Dobbins-Camp）BOD-DO模型

对一维稳态河流，在托马斯模型的基础上，添加1）因底泥释放BOD和地表径流所引起的BOD变化速率，R；2）藻类光合作用和呼吸作用以及地表径流引起的溶解氧速率变化，P两项。即采用以下的基本方程组

$$\frac{Ld}{dx} = -(k_1+k_3)L+R \tag{2·71}$$

$$u\frac{dO}{dx} = -k_1L+k_2(O_s-O)-P \tag{2·72}$$

在$L(0)=L_0$，$D(0)=D_0$的初值条件下，得多宾斯-坎普BOD-DO模型的积分解

$$\begin{cases} L=L_0F_1+\dfrac{R}{k_1+k_3}(1-F_1) \\ O=O_s-(O_s-O_0)F_2+\dfrac{k_1}{k_1+k_3-k_2}\left(L_0-\dfrac{R}{k_1+k_3}\right)(F_1-F_2) \\ \qquad -\left(\dfrac{P}{k_2}+\dfrac{k_1R}{k_2(k_1+k_3)}\right)(1-F_2) \end{cases}$$

或

$$D=D_0F_2-\frac{k_1}{k_1+k_3-k_2}\left(L_0-\frac{R}{k_1+k_3}\right)(F_1-F_2)$$
$$+\left(\frac{P}{k_2}+\frac{k_1R}{k_2(k_1+k_3)}\right)(1-F_2) \tag{2·73}$$

$$F_1=\exp\left(-\frac{(k_1+k_3)x}{u}\right) \tag{2·74}$$

$$F_2=\exp\left(-\frac{k_2x}{u}\right) \tag{2·75}$$

式中：L, L_0——$x=x$和$x=0$处河水BOD浓度，〔ML^{-3}〕；

O, O_0——$x=x$和$x=0$处河水溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

D, D_0——$x=x$和$x=0$处河水氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

O_s——河水T℃时的饱和溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

x——离排污口（$x=0$）的河水流动距离，〔L〕；

u——河水平均流速，〔LT^{-1}〕；

k_1——BOD衰减系数，〔T^{-1}〕；

k_2——河水复氧系数，〔T^{-1}〕；

k_3——BOD沉浮系数，〔T^{-1}〕；

R——底泥释放BOD引起的变化率，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

P——藻类光合、呼吸作用或地表径流所引起的溶解氧变化率，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕。

多宾斯-坎普BOD-DO模型中，当参数R、P为零时，该模型即为托马斯BOD-DO模型。当参数k_3也为零时，该模型即成为斯特里特-菲尔普斯BOD-DO模型。

【例题2-9】

某河段$u=19.2\text{km/d}$，河段长$x=8\text{ km}$，已知该河段$k_1=0.95\text{d}^{-1}$，$k_2=5.67\text{d}^{-1}$，$k_3=0.2\text{d}^{-1}$，$R=1\text{mg/(l·d)}$，$P=4\text{mg/(l·d)}$ $L_0=20.6\text{mg/l}$，$O_s=7.85\text{mg/l}$，$O_0=6.85\text{mg/l}$。

计算该河段末端河水的BOD和溶解氧亏值。

解：用计算程序可算得

$$L=13.09\text{mg/l}$$

$$D=3.01\text{mg/l}。$$

六 奥康纳（O'Connon）BOD-DO模型

对一维稳态河流，在托马斯模型的基础上，除考虑CBOD外还考虑NBOD的衰减与耗氧作用。采用以下的基本方程组

$$\begin{cases} u\left(\dfrac{\mathrm{d}L_C}{\mathrm{d}x}\right)=-(k_1+k_3)L_C \\ u\dfrac{\mathrm{d}L_N}{\mathrm{d}x}=-k_NL_N \\ u\dfrac{\mathrm{d}O}{\mathrm{d}x}=-k_1L_C-k_NL_N+k_2(O_s-O) \end{cases} \tag{2·76}$$

或

$$u\ \frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}x}=k_1L_C+k_NL_N-k_2D$$

在起始条件为$L_{C(0)}=L_{0(C)}$，$L_{N(0)}=L_{0(N)}$ $O_{(0)}=O_0$时可求解得到奥康纳积分方程组

$$
\begin{cases}
L_C = L_{0(C)}\exp\left[-\dfrac{(k_1+k_3)}{u}x\right] \\
L_N = L_{0(N)}\exp\left[-\dfrac{k_N}{u}x\right] \\
O = O_s - (O_s - O_0)\exp\left[-\dfrac{k_2}{u}x\right] + \dfrac{k_1 L_{0(C)}}{k_1+k_3-k_2}
\end{cases}
\tag{2·77}
$$

$$
\times\left[\exp\left(-\frac{k_1+k_3}{u}x\right)-\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)\right]+\frac{k_N L_{0(N)}}{k_N-k_2}
$$

$$
\times\left[\exp\left(-\frac{k_N}{u}x\right)-\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)\right]
$$

或

$$
D = D_0\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)-\frac{k_1 L_{0(C)}}{k_1+k_3-k_2}\left[\exp\left(-\frac{k_1+k_3}{u}x\right)\right.
$$

$$
\left.-\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)\right]-\frac{k_N L_{0(N)}}{k_N-k_2}\left[\exp\left(-\frac{k_N}{u}x\right)\right.
$$

$$
\left.-\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)\right]
$$

式中：L_C，$L_{0(C)}$——$x=x$和$x=0$处河水CBOD的浓度，$[ML^{-3}]$；

L_N，$L_{0(N)}$——$x=x$和$x=0$处河水NBOD的浓度，$[ML^{-3}]$；

O，O_0——$x=x$和$x=0$处河水溶解氧浓度，$[ML^{-3}]$；

D，D_0——$x=x$和$x=0$处河水溶解氧亏浓度，$[ML^{-3}]$；

O_s——河水T℃时饱和溶解氧浓度，$[ML^{-3}]$；

x——离排污口（$x=0$）的河水流动距离，$[L]$；

k_1——CBOD衰减系数，$[T^{-1}]$；

k_2——河水复氧系数，$[T^{-1}]$；

k_3——CBOD沉浮系数，$[T^{-1}]$；

k_N——NBOD衰减系数，$[T^{-1}]$。

用奥康纳BOD-DO模型计算CBOD，NBOD和氧亏的计算图（见图2-14）。

$Q_{W(i)}$, $D_{W(i)}$　　$Q_{W(i+1)}$, $D_{W(i+1)}$

$L_{W(i)}$, $L_{NW(i)}$　　$L_{W(i+1)}$, $L_{NW(i+1)}$

A_{i-1}, QT_{i-1}, u_{i-1}　　A_i, QT_i, u_i　　A_{i+1}, QT_{i+1}, u_{i+1}

$k_{1(i-1)}$, $k_{2(i-1)}$　　$k_{1(i)}$, $k_{2(i)}$　　$k_{1(i+1)}$, $k_{2(i+1)}$

$k_{3(i-1)}$, $k_{N(i-1)}$　　$k_{3(i)}$　$k_{N(i)}$　　$k_{3(i+1)}$, $k_{N(i+1)}$

$QT_i = Q_{i+1}$　　$QT_{i+1} = Q_{i+2}$

$L_{0(i)}$　　$L_{0(i+1)}$

$L_{NO(i+1)}$　　$L_{NO(i+1)}$

$i-1$　　$D_{0(i)}$　　i　　$D_{0(i+1)}$　　$i+1$

图2-14　奥康纳模型预测BOD-DO的计算示意图

【例题2-10】

如表2-6的河流各断面特性数据。求各河段始末两端CBOD，NBOD和溶解氧亏D。

解：用程序计算，结果如表2-7。

表2-6 河流各断面的特性数据

断面	A	Q	Q_W	x	k_1	k_2	k_3	k_N	LW	NW	DW
i	m^2	m^3/S	m^3/S	km	d^{-1}	d^{-1}	d^{-1}	d^{-1}	mg/l	mg/l	mg/l
1	19.5	3.8	0	8	0.95	3.89	0.2	0.05	0	0	0
2	19.5	3.8	1.14	3.2	0.95	3.17	0	0.2	100	15	8
3	37.2	4.94	0	6.4	0.95	2.30	0	0.15	0	0	0
4	26.0	4.94	0.84	8	0.95	5.69	0	1.25	150	50	8
5	37.2	5.78	0	4.8	0.95	4.02	0	1	0	0	0

$L_0=0.305$mg/l， $N_0=0.1$mg/l， $D_0=0$，(水温$T=28$℃)。

表2-7 由奥康纳模型计算得到的河段始末两端的水质

河段号	位置	CBOD(mg/l)	NBOD(mg/l)	D(mg/l)
1	始端	0.3050	0.1000	0.0000
	末端	0.1757	0.0976	0.0159
2	始端	23.2121	3.5366	1.8815
	末端	20.2020	3.4347	3.6611
3	始端	20.2020	3.4347	3.6611
	末端	11.8920	3.1590	5.5963
4	始端	31.9631	9.9863	5.9457
	末端	21.5182	5.9214	5.6740
5	始端	21.5182	5.9214	5.6744
	末端	15.3209	4.1413	5.4127

七 简化的一维稳态河流BOD-DO模型

考虑到城市附近河流的排污口入流密集，河段的分段计算和河水的实测都十分困难。因此作者提出对这种情况将实际的河流系统简化为以下的图示模式（见2-15图）

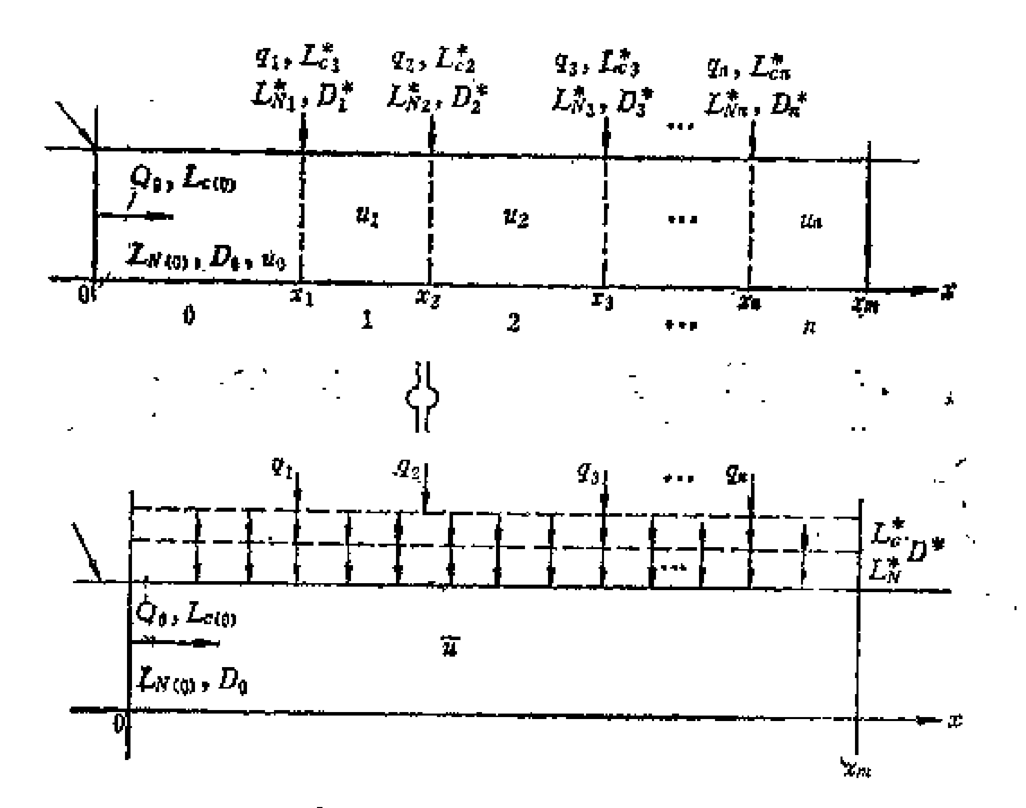


图2-15简化的一维稳态河流BOD-DO图示模型

图中模拟的河流侧向排污入流

$$L_c^* = \frac{\sum_1^n q_i L_{ci}^*}{\sum q_i} \tag{2·78}$$

$$L_N^* = \frac{\sum_1^n q_i L_{Ni}^*}{\sum q_i} \tag{2·79}$$

$$D^* = \frac{\sum_1^n q_i D_i^*}{\sum q_i} \tag{2·80}$$

式中： L_c^*, L_N^*, D^*——模拟的侧向排污均匀入流的CBOD、NBOD和氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

q_i——第i个单元侧向污水入流量，〔L^3T^{-1}〕；（$i=0,1, 2, \cdots, n$）；

$L_{ci}^*, L_{Ni}^*, D_i^*$——第$i$个单元实际的侧向污水入流的CBOD、NBOD和氧亏浓度，〔ML^{-3}〕。

图中模拟的河段平均流速

$$\bar{u} = \frac{\sum_{0}^{n} u_i(x_{i+1} - x_i)}{x_m} \tag{2·81}$$

式中： $\bar{u}$——模拟的河段（$x = x_m$）平均流速，〔LT^{-1}〕；

u_i——第 i-1 单元的实际流速，〔LT^{-1}〕；

x_i——第 i 单元末端的坐标距离，〔L〕；

x_m——第n单元末端坐标距离(即河段长度)，〔L〕。

对上述图示模式，在奥康纳模型基本方程的基础上，可得到以下的基本方程

$$\begin{cases} \bar{u}\dfrac{dL_c}{dx} = -(k_1 + k_3)L_c + L_c^* \\ \bar{u}\dfrac{dL_N}{dx} = -k_N L_N + L_N^* \\ u\dfrac{dD}{dx} = +k_1 L_c + k_N L_N - k_2 D + D^* \end{cases} \tag{2·82}$$

在初始条件为$L_{C(0)} = L_{0(C)}$，$L_{N(0)} = L_0(N)$和$D_{(X=0)} = D_0$时，可求得如下的稳态河流水质积分解：

$$L_{c(x)} = L_{0(c)}F_1 + \frac{L_C^*}{k_1 + k}(1 - F_1) \tag{2·83}$$

$$L_{N(x)} = L_{0(N)}F_N + \frac{L_N^*}{k_N}(1 - F_N) \tag{2·84}$$

$$D_{(x)} = D_0F_2 - \frac{k_1}{k_1 + k_3 - k_2}\left(L_{0(c)} - \frac{L_C^*}{k_1 + k_3}\right)(F_1 - F_2)$$

$$-\frac{k_N}{k_N - k_2}\left(L_{0(N)} - \frac{L_N^*}{k_N}\right)(F_1 - F_2)$$

$$+\left(\frac{D^*}{k_2} + \frac{k_1 L_C^*}{k_2(k_1 + k_3)}\right)(1 - F_2)$$

$$+\left(\frac{D^*}{k_3}+\frac{L_N^*}{k_2}\right)(1-F_2) \tag{2·85}$$

$$F_1=\exp\left(-\frac{(k_1+k_3)x}{u}\right) \tag{2·86}$$

$$F_N=\exp\left(-\frac{k_N x}{u}\right) \tag{2·87}$$

$$F_2=\exp\left(-\frac{k_2 x}{u}\right) \tag{2·88}$$

式中：$L_{c(x)}, L_{N(x)}, D_{(x)}$——河段内$x$坐标距离处河水的 CBOD、NBOD和氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

$L_{0(c)}, L_{0(N)}, D_0$——河段起始断面($x=0$)处河水的CBOD NBOD和氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

L_c^*，L_N^*，D^*——河段侧向污水入流的CBOD、NBOD和氧亏浓度速率，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

k_1、k_2、k_3——河水中CBOD、NBOD的降解速率系数和CBOD沉浮速率系数，〔T^{-1}〕；

x——河水流动距离坐标，〔L〕；

u——河段模拟的平均流速，〔LT^{-1}〕；

k_2——河水大气复氧系数，〔T^{-1}〕。

上述模型中，虽没有直接考虑，藻类光合作用的增氧作用和底泥与藻类呼吸的耗氧作用，但它们的影响是隐含在k_1和k_2内了。上述模型用于忽略CBOD的沉浮作用时，将式（2.83）—(2.85）中的$k_3=0$即可得

$$L_{c(x)}=L_{0(c)}F_1+\frac{L_C^*}{k_1}(1-F_1) \tag{2·89}$$

$$L_{N(x)}=L_{0(N)}F_N+\frac{L_N^*}{k_N}(1-F_N) \tag{2·90}$$

$$D_{(x)}=D_0F_2-\frac{k_1}{k_1-k_2}\left(L_{0(c)}-\frac{L_C^*}{k_1}\right)(F_1-F_2) \tag{2·91}$$

$$-\frac{k_N}{k_N-k_2}\left(L_{0(N)}-\frac{L_N^*}{k_N}\right)(F_1-F_2)+\left(\frac{2D^*+L_C^*+L_N^*}{k_2}\right)(1-F_2)$$

$$F_1=\exp\left(-\frac{k_1 x}{u}\right) \tag{2.92}$$

$$F_N=\exp\left(-\frac{k_N x}{u}\right) \tag{2.93}$$

$$F_2=\exp\left(-\frac{k_2 x}{u}\right) \tag{2.94}$$

式中符号意义同上。

八　一维河流的有限差分水质模型

（一）数值解法与有限差分

一般非稳态的水质模型基本方程难以用解析法求解。随着电子计算机的应用，数值解法受到很大重视。数值解法有有限差分法和有限元法等。

在解析法中，变量的空间和时间坐标都是连续的，而数值解法是空间离散的（如有限元法），也可以是空间和时间都被离散化（如有限差分法）。有限差分法形成图2-16所示的x-t网格平面。

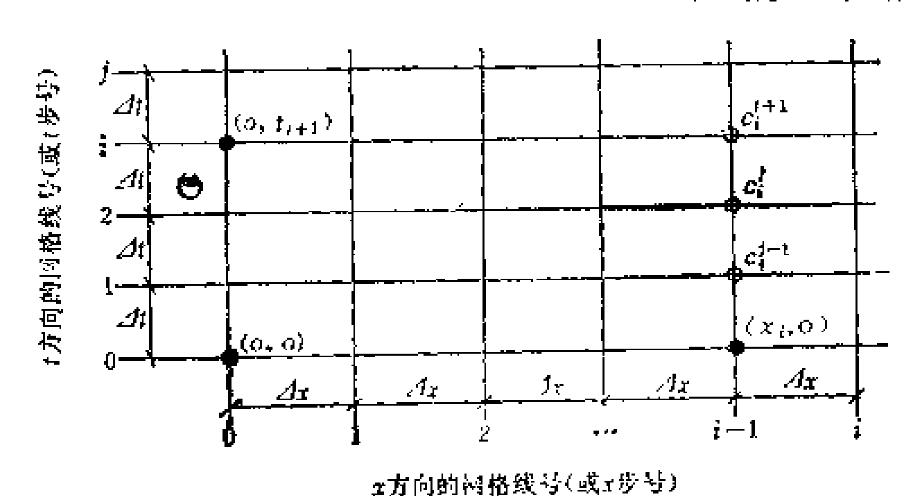


图2-16　x—t网格平面示意图

图中Δx为x方向的步长，Δt为t方向的步长。$x_i=i\Delta x$，$t_j=j\Delta t$。两个网格线交点构成网格结点，其位置用（x_i，t_j）来表示，边

界结点用（0，t_j）和（x_i，0）表示 任意点的水质浓度用c（x_i，t_j）或c_i^j表达。

浓度对空间位置的偏微商$\frac{\partial c}{\partial x}$和$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$以及浓度对时间的偏微商$\frac{\partial c}{\partial t}$，可以用三种差分格式的差分商来近似地代替

	中心差分	向后差分	向前差分
$\frac{\partial c}{\partial x}$	$\frac{c_{i+1}^j - c_{i-1}^j}{2\Delta x}$	$\frac{c_i^j - c_{i-1}^j}{\Delta x}$	$\frac{c_{i+1}^j - c_i^j}{\Delta x}$
$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$	* $\frac{c_{i+1}^j - 2c_i^j + c_{i-1}^j}{\Delta x^2}$	$\frac{c_i^j - 2c_{i-1}^j + c_{i-2}^j}{\Delta x^2}$	$\frac{c_{i+2}^j - 2c_{i+1}^j + c_i^j}{\Delta x^2}$
$\frac{\partial c}{\partial t}$	$\frac{c_i^{j+1} - c_i^{j-1}}{2\Delta t}$	$\frac{c_i^j - c_i^{j-1}}{\Delta t}$	$\frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t}$

对位置的差分商可以取在时刻t_{j+1}或t_j时的浓度值，也可以用这两个时刻相应浓度的加权平均值。如果我们只用时刻t_j时的浓度来表达位置的差分商，则这种格式称为显式（explicit）差分格式。由于这种格式具有t_{j+1}时刻的浓度值c_i^{j+1}可以被表达为在时刻t_j的浓度值的函数的特性，这样就便于从起始条件迭代求出各时刻的浓度值。其它的格式则称为隐式（implicit）差分和混合式差分格式。

〔注〕* 二阶导数$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$的差分格式（中心差分为例）

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \doteq \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{c_{i+1}^j - c_i^j}{\Delta x}\right) \doteq \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{c_{i+1}^j - c_i^j}{\Delta x} - \frac{c_i^j - c_{i-1}^j}{\Delta x}\right)$$

$$= \frac{c_{i+1}^j - 2c_i^j + c_{i-1}^j}{\Delta x^2}$$

差分格式应满足一定的位置步长与时间步长之间的关系，以保持计算中数值的稳定（运算中的舍入误差能保持有限或逐渐消失，而不是不断增长）和收敛（即差分方程的近似解能收敛或逼近于原微分方程的精确解）。隐式差分格式一般可以无条件地满足稳定性的要求。

（二）一维河流的有限差分水质模型

一维河流的偏微分水质模型的基本方程为

为 $\dfrac{\partial c}{\partial t}+u\dfrac{\partial c}{\partial x}+E\dfrac{\partial^2 c}{\partial x^2}-k_1c+S$

1.显式有限差分格式解

可如图2-17的河流段分成有限的n单元。

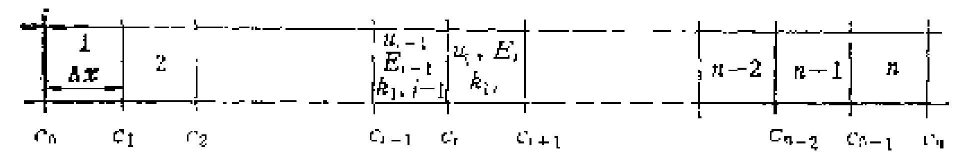


图2-17 有限差分法河段单元图

若采用四点差分格式（如图2-18）；即在j时刻时，用前差分表达t的偏导数和x的一阶偏导数，用中心差分表达x的二阶偏导数，可将一维河流水质偏微分方程近似表达为如下的差分方程式

$$\frac{c_i^{j+1}-c_i^j}{\Delta t}+u_i\frac{c_{i+1}^j-c_i^j}{\Delta x}=E_i\frac{c_{i+1}^j-2c_i^j+c_{i-1}^j}{\Delta x^2}-k_{1i}c_i^j+S_i \tag{2·95}$$

式中：E_i——第i河段纵向弥散系数；

u_i——第i河段平均流速。

经整理可得

$$c_i^{j+1}=c_{i+1}^j\left(\frac{E_i\Delta t}{\Delta x^2}-\frac{u_i\Delta t}{\Delta x}\right)$$

$$+c_i^j\left(1-\frac{E_i\Delta t}{\Delta x^2}-\frac{u_i\Delta t}{\Delta x}-k_{1i}\Delta t\right)$$

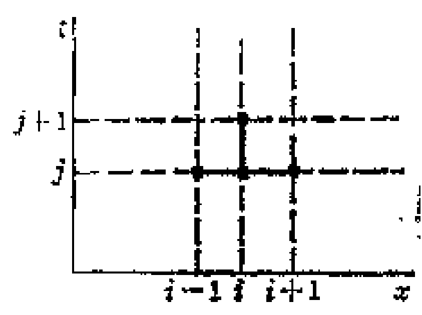


图2-18 显式四点差分格式

$$+c_{i-1}^{j}\left(\frac{E_{i}\Delta t}{\Delta x^{2}}\right)+S_{i} \tag{2·96}$$

由上式可见第i断面（$j+1$）时刻的浓度值，可由前一时刻即j时刻的（$i+1$），i，（$i-1$）断面的浓度值以及其它参数（弥散系数E_i，平均流速u_i、时间步长Δt与位置步长Δx以及污染物衰减系数k_{1i}）迭代计算而得。因此，若已知初始时刻$j=0$时各断面的浓度值c_i^0和起始断面各时刻的浓度值c_0^j，且令$c_{-1}^j=c_0^j$，$c_{n+1}^j=2c_n^j-c_{n-1}^j$即可迭代求出各断面、各时刻的浓度$c_i^j$。

采用显式差分格式时，可能出现不稳定解。为了使解是稳定和收敛的必须使“步长比”（或网格比）满足如下关系式

$$\frac{\Delta t}{\Delta x}\leqslant\frac{1}{u},\quad \frac{\Delta t}{\Delta x^{2}}\leqslant\frac{1}{2E} \tag{2·97}$$

用方程2.96来计算浓度沿程分布时，计算是很繁杂的。但利用电子计算机计算则是很方便的。

2.隐式差分格式解

显式差分解有时受稳定性条件的限制，不能达到足够的精度，这时可用隐式差分格式来求解。仍采用四点差分格式（如图2-19）：用前差分表达t的偏导数和x的一阶偏导数，用中心差分表达x的二阶偏导数，可将一维河流水质偏微分方程近似表达为如下的差分方程式

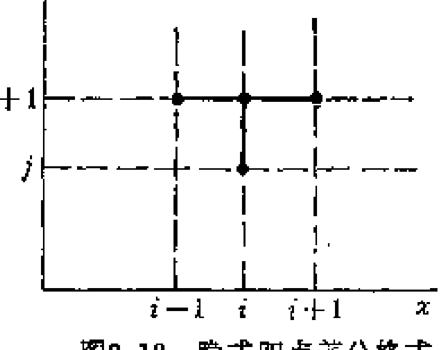


图2-19 隐式四点差分格式

$$\frac{c_i^{j+1}-c_i^j}{\Delta t}+u_i\frac{c_{i+1}^{j+1}-c_i^{j+1}}{\Delta x}=E_i\frac{c_{i+1}^{j+1}-2c_i^{j+1}+c_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^{2}}$$

$$-k_{1i}c_i^{j+1}+S_i \tag{2·98}$$

经整理后得如下：

$$c_{i-1}^{j+1}\left(-\frac{E_i}{\Delta x^2}\right)+c_i^{j+1}\left(\frac{1}{\Delta t}+\frac{2E_i}{\Delta x^2}-\frac{u_i}{\Delta x}+k_{1i}\right)+c_{i+1}^{j+1}\left(\frac{u_i}{\Delta x}-\frac{E_i}{\Delta x^2}\right)=\frac{c_i^j}{\Delta t}+S_i \tag{2·99}$$

或写成 $\alpha_i c_{i-1}^{j+1}+\beta_i c_i^{j+1}+\gamma_i c_{i+1}^{j+1}=\delta_i$ (2·100)

$$\alpha_i=-\frac{E_i}{\Delta x^2} \tag{2·101}$$

$$\beta_i=\left(\frac{1}{\Delta t}+\frac{2E_i}{\Delta x^2}-\frac{u_i}{\Delta x}+k_{1i}\right) \tag{2·102}$$

$$\gamma_i=\frac{u_i}{\Delta x}-\frac{E_i}{\Delta x^2} \tag{2·103}$$

$$\delta_i=\frac{c_i^j}{\Delta t}+S_i \tag{2·104}$$

引入边界条件

当 $i=1$ 时， $\beta_1 c_1^{j+1}+\gamma_1 c_2^{j+1}=\delta_1'$ (2·105)

$$\delta_1'=\delta_1+\frac{E_1}{\Delta x^2}c_0^{j+1} \tag{2·106}$$

当 $i=n$ 时，令 $c_{n+1}^{j+1}=2c_n^{j+1}-c_{n-1}^{j+1}$， (2·107)

则 $\alpha_n' c_{n-1}^{j+1}+\beta_n' c_n^{j+1}=\delta_n$ (2·108)

$$\alpha_n'=(\alpha_n-\gamma_n) \tag{2·109}$$

$$\beta_n'=(\beta_n+2\gamma_n) \tag{2·110}$$

（2.100）方程组每一方程只含有三个非零元素，并且排列整齐，在总的系数矩阵中形成一个三对角线的阶状分布，故写成矩阵形式如下：

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & & \\ & \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3 & \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & & \alpha_n' & \beta_n' & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \delta_3 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \quad (2\cdot111)$$

其矢量形式为

$$\mathbf{AC} = \delta \quad (2\cdot112)$$

向量$\mathbf{A}$和δ中各元素均由各已知量（包括迭代初值）组成的已知系数。

应用矩阵运算法则，很容易求出各时刻（如$j+1$时刻）各断面的浓度值

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^{-1}\delta \quad (2\cdot113)$$

或

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & \alpha_n' & \beta_n' & \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \quad (2\cdot114)$$

隐式差分格式一般是绝对稳定的。但为了避免数值离散，还必须使时间—距离步长比满足关系式

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leqslant \frac{1}{u} \quad (2\cdot115)$$

显式差分方程组的矩阵是三角形的，它的每一个未知函数值，都通过前面已经求得的值表示出来，其计算简便，但稳定性的要求，须限制其网格比，故计算时不可靠也不方便。隐式差分方程组的矩阵是三对角线矩阵，涉及到解此组代数方程组。解三对角矩阵方程的方法通常可采用托马斯的“追赶法”。

3.混合式差分格式解

采用显式和隐式相结合的混合式差分格式具有其优点。

例如，以前差分表达 t 的偏导数，以j时刻的后差分格式表达x的一阶偏导数，又以（$j+1$）时刻的中心差分格式表达 x 的二阶导数。其格式图如图2-20的五点差分格式。则原一维河流水质偏微分方程可用如下的差分方程来代替

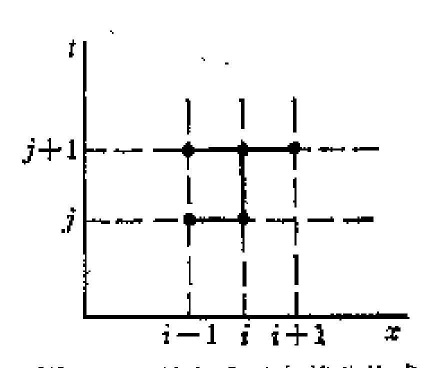


图2-20 混合式五点差分格式

$$\frac{c_i^{j+1}-c_i^j}{\Delta t}+u_i\frac{c_i^j-c_{i-1}^j}{\Delta x}=E_i\frac{c_{i+1}^{j+1}-2c_i^{j+1}+c_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2}$$

$$-k_{1i}\frac{\left(c_i^{j+1}+c_{i-1}^j\right)}{2}+S_i \qquad (2\cdot116)$$

经整理得

$$c_{i-1}^{j+1}\left(-\frac{E_i}{\Delta x^2}\right)+c_i^{j+1}\left(\frac{1}{\Delta t}+\frac{2E_i}{\Delta x^2}+\frac{k_{1i}}{2}\right)+c_{i+1}^{j+1}\left(-\frac{E_i}{\Delta x^2}\right)$$

$$=c_i^j\left(\frac{1}{\Delta t}-\frac{u_i}{\Delta x}\right)+c_{i-1}^j\left(\frac{u_i}{\Delta x}-\frac{k_{1i}}{2}\right)+S_i \qquad (2\cdot117)$$

或写成

$$\alpha_i\, c_{i-1}^{j+1}+\beta_i\, c_i^{j+1}+\gamma_i\, c_{i+1}^{j+1}=\delta_i \qquad (2\cdot118)$$

$$\alpha=\gamma_i=-\frac{E_i}{\Delta x^2} \qquad (2\cdot119)$$

$$\beta_i=\frac{1}{\Delta t}+\frac{2E_i}{\Delta x^2}+\frac{k_{1i}}{2} \qquad (2\cdot120)$$

$$\delta_i=c_i^j\left(\frac{1}{\Delta t}-\frac{u_i}{\Delta x}\right)+c_{i-1}^j\left(\frac{u_i}{\Delta x}-\frac{k_{1i}}{2}\right)+S_i$$

$$(2\cdot121)$$

引入边界条件

对$i=1$，第1个方程为$\beta_1\, c_1^{j+1}+\gamma_1\, c_2^{j+1}=\delta_1-\alpha_1 c_0^{j+1}$

$$(2\cdot122)$$

对$i=n$，以下游边界条件定为 $c_{n+1}^{j+1}=2c_n^{j+1}-c_{n-1}^{j+1}$

代入式（2·118），得第n个方程为：

$$(\alpha_n-\gamma_n)\,c_{n-1}^{j+1}+(\beta_n+2\gamma_n)\,c_n^{j+1}=\delta_n \tag{2·123}$$

这样，式（2·118）就变成如下的总系数矩阵为三对角线矩阵的矩阵方程式

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & & \\ & \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3 & \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & & \alpha_n' & \beta_n' & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \delta_3 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \tag{2·124}$$

式中：

$$\alpha_n'=\alpha_n-\gamma_n \tag{2·125}$$

$$\beta_n'=\beta_n+2\gamma_n \tag{2·126}$$

$$\delta_1'=\delta_1-\alpha_1 c_0^{j+1} \tag{2·127}$$

对$i=1,\cdots,n$　　$\delta_i=c_i^j\left(\frac{1}{\Delta t}-\frac{u_i}{\Delta x}\right)+c_{i-1}^j\left(\frac{u_i}{\Delta x}-\frac{k_{1i}}{2}\right)$

这种混合式差分格式也是无条件稳定的，但为了避免数值离散，要求步长比满足

$$\frac{u}{\Delta x}=\frac{1}{\Delta t}$$

此时，　$\delta_i=c_{i-1}^j\left(\frac{u_i}{\Delta x}-\frac{k_{1i}}{2}\right)$　　(2·128)

4.混合式（或隐式）差分方程的“追赶法”求解的过程与程序

已知河流水质的混合式差分矩阵方程为

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} \\ & & \alpha_n' & \beta_n' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \tag{2·129}$$

即 $$AC=\delta \tag{2·130}$$

将矩阵A分解成

$$A=BW \tag{2·131}$$

式中新构造的矩阵为

$$B=\begin{pmatrix} b_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & \\ & & & a'_n & \end{pmatrix} \tag{2·132}$$

$$W=\begin{pmatrix} 1 & w_1 & & & \\ & 1 & w_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & w_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{2·133}$$

则

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & b_1w_1 & & & \\ a_2 & b_2+a_2w_1 & b_2w_2 & & \\ & a_3 & b_3+a_3w_2 & b_3w_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & a_{n-1} & b_{n-1}+a_{n-1}w_{n-2} & b_{n-1}w_{n-1} \\ & & & a'_n & b_n+a'_nw_{n-1} \end{pmatrix} \tag{2·134}$$

由矩阵方程（2.134）和（2.129）可求得B、W矩阵中的元素b_i和w_i

$$b_1=\beta_1 \tag{2·135}$$

$$b_1w_1=\gamma_1 \qquad 所以w_1=\frac{\gamma_1}{b_1} \tag{2·136}$$

$$b_2+a_2w_1=\beta_2$$

$$b_iw_i=\gamma_i \quad 所以\ w_i=\frac{\gamma_i}{b_i},\ (i=1,\cdots,n-1) \tag{2·137}$$

$$b_i+a_iw_{i-1}=\beta_i \qquad 所以b_i=\beta_i-a_iw_{i-1} \tag{2·138}$$

$$b_n=\beta'_n-a'_nw_{n-1} \tag{2·139}$$

又令 $$WC=Y \tag{2·140}$$

式中： $$Y=(y_1,y_2,\cdots,y_n)^T \tag{2·141}$$

则 $$BY=\delta \tag{2·142}$$

即

$$\begin{pmatrix} b_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & \\ & & & a_n & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \tag{2·143}$$

由矩阵方程（2.143）可求得Y矩阵的各元素y_i

$$b_1 y_1 = \delta_1' \qquad 所以 y_1 = \frac{\delta_1'}{b_1} \tag{2·144}$$

$$a_2 y_1 + b_2 y_2 = \delta_2 \qquad y_2 = \frac{\delta_2 - a_2 y_1}{b_2}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$a_i y_{i-1} + b_i y_i = \delta_i \qquad y_i = \frac{\delta_i - a_i y_{i-1}}{b_i}$$

$$(i = 2, \cdots, n-1) \tag{2·145}$$

$$a_n' y_n = \delta_n \qquad y_n = \frac{\delta_n}{a_n'} \tag{2·146}$$

又因

$$\begin{pmatrix} 1 & w_1 & & & \\ & 1 & w_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & w_{n-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} \tag{2·147}$$

则

$$c_1^{j+1} + w_1 c_2^{j+1} = y_1$$

$$c_2^{j+1} + w_2 c_3^{j+1} = y_2 \qquad 所以 c_i^{j+1} = y_i - w_i c_{i+1}^{j+1}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots \qquad (i = 1, \cdots, n-1) \tag{2·148}$$

$$c_{n-1}^{j+1} + w_{n-1} c_n^{j+1} = y_{n-1}$$

$$c_n^{j+1} = y_n \qquad c_n^{j+1} = y_n \tag{2·149}$$

追赶计算程序如下：

首先按（2·135）—（2·139）式作“追”的过程，从而可求出b_i和w_i。进而按(2·144)—(2·146)式可求得

y_i（$i = 1, \cdots, n-1$）和y_n。

然后按式（2·148）和式（2·149）进行“赶”的过程，可求得 c_n^{j+1}，c_{n-1}^{j+1}，…，c_1^{j+1}。

以上计算得第$j+1$时间层的各位置节点的浓度值。同样方法，可算得其它各层的浓度值c_i^j。整个追赶计算过程是稳定的。

九　二维河流的有限元水质模型

考察图2-21的二维水体。图中用二维网络分割，形成一个空间离散的流体元系统。当污染物经过此环境介质进行迁移时，从一个单元移到另一个单元。相邻两个单元之间的迁移用画在边界上的箭头表示。各个单元沿第三维方向假定是均匀的。

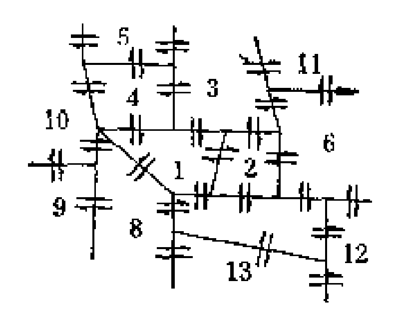


图2-21　用二维网络分割环境介质形成离散的流体单元系统

对于某种污染物，可以给出通过任意单元的质量平衡的一般表达式

$$V_i\frac{dc_i}{dt}=\sum_j\left(G_{ji}+D_{ji}\right)-S_i \qquad (2·150)$$

式中：$\frac{dc_i}{dt}$——第i单元中污染物浓度的变化率，$[M^{-3}T^{-1}]$；

V_i——第i单元流体的体积，$[L^3]$；

G_{ji}——由平流引起的污染物从j到i的迁移，$[MT^{-1}]$；

D_{ji}——由扩散引起的污染物从j到i的迁移，$[MT^{-1}]$；

S_i——第i单元中污染物的源漏项，$[MT^{-1}]$。

平流迁移率可表成：

$$G_{ji}=Q_{ji}\left[\delta_{ji}c_j+(1-\delta_{ji})c_i\right] \qquad (2·151)$$

式中：Q_{ji}——水体从元j到元i的体积迁移，$[L^3T^{-1}]$；

δ_{ji}——有效平流系数，是一个比例常数。以相邻两个

元中的平均浓度表示边界上的污染物浓度。系数的值一般在0.5—1.0范围内，取决于所考察的环境系统的一般特性。

扩散率为

$$D_{ji}=E'_{ji}(c_j-c_i) \tag{2·152}$$

式中：E'_{ji} ——混合系数，〔L^3T^{-1}〕。混合系数与扩散系数相似。但此处表示的关系是线性的，而在连续模型中扩散项是二次的。

把方程2·151和2·152代入方程2·150，得

$$V_i\frac{dc_i}{dt}=\sum_j\left\{Q_{ji}\left[\delta_{ji}c_j+(1-\delta_{ji})c_i\right]+E'_{ji}(c_j-c_i)\right\}-S_i \tag{2·153}$$

当稳态条件下，dc_i/dt等于0；并设源漏项S_i不含同浓度c_i有关的项（如衰减项），而且仅含一个表示污染物从介质外来源进入的单项f_i。则稳态的迁移质量平衡式可表为

$$\left\{\sum_j\left[E'_{ji}-(1-\delta_{ji})Q_{ji}\right]\right\}c_i-\sum_j\left[\left(\delta_{ji}Q_{ji}+E'_{ji}\right)c_j\right]=f_i \tag{2·154}$$

对于$i=1$，式（2·154）可写成

$$a_{11}c_1+a_{21}c_2+a_{31}c_3+\cdots+a_{n1}c_n=f_1 \tag{2·155}$$

式中：$a_{11}=\sum_j^n\left[E'_{j1}-(1-\delta_{j1})Q_{j1}\right]$ （对$j\neq1$） (2·156)

$a_{j1}=-\left(\delta_{j1}Q_{j1}+E'_{j1}\right)$ （对$j=2,3,\cdots,n$） (2·157)

由于$Q_{ji}=-Q_{ij}$，$E'_{ji}=E'_{ij}$，$\delta_{ji}=\delta_{ij}$。方程（2·155）可改写为

$$a_{11}c_1+a_{12}c_2+\cdots+a_{1n}c_n=f_1 \tag{2·158}$$

式中：$a_{11}=\sum_j^n\left[E'_{1j}+(1-\delta_{1j})Q_{1j}\right]$ （对$j\neq1$） (2·159)

$$a_{1j}=\delta_{1j}Q_{1j}-E'_{1j}\qquad (对 j=2,3,\cdots,n) \tag{2•160}$$

（注意，上述表达式中的Q，当流向为i流入段时为正，当流向是从段i流出时为负。）

对于单元$i=2，3，\cdots，u$，重复同样的步骤，得如下的常系数线性方程组：

$$\begin{aligned} a_{11}c_1+a_{12}c_2+\cdots+a_{1n}c_n&=f_1\\ a_{21}c_1+a_{22}c_2+\cdots+a_{2n}c_n&=f_2\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots&\cdots\\ a_{n1}c_1+a_{n2}c_2+\cdots+a_{nn}c_n&=f_n \end{aligned} \tag{2•161}$$

方程2.161为图2-21所表示的系统的稳态模型。由于系统中的各个单元很少有同四个以上单元具有公共的边界，因此很多系数a_{ij}为0。

这样的方程组可表示成如下的矩阵形式：

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} f_1\\ f_2\\ \vdots\\ f_n \end{bmatrix} \tag{2•162}$$

用矢量表示，则变成

$$\mathbf{AC}=\mathbf{F} \tag{2•163}$$

而未知浓度向量的解为

$$\mathbf{C}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{F} \tag{2•164}$$

式中： $\mathbf{A}^{-1}$称为“单载矩阵”。

只要解得单载矩阵，就可以乘上任一向量$\mathbf{F}$，得到相应的浓度向量$\mathbf{C}$。此外，利用单载矩阵的特性，可以确定任一单元中由任一其他单元中的来源所产生的那部分浓度。例如，单载矩阵$\mathbf{A}^{-1}$中第i行和第j列的元素Φ_{ij}，其数值等于由单元j中的一个单值来源在单元i中所产生的浓度。用单元j中来源项的实际值乘元素Φ_{ij}，就得到由源项在单元i中所产生的那部分浓度。因此单元i中

的总浓度为

$$c_i = \sum_j \Phi_{ij} f_i$$

元素Φ_{ij}有时称为“稳态迁移函数”。

第四节　河流水质模拟计算

一　一维稳态河流氧亏和BOD变化曲线的计算

利用多宾斯-坎普一维稳态河流BOD-DO模型，根据河流特性数据作出河水BOD—DO氧亏变化曲线。

算图见图2-22。

【例题2-11】

已知以下河流各断面的特性数据：（见表2-8）

表2-8　河流各断面的特性参数

段面号	A	Q	K	M	N	R	P	B	D	X
	m^2	m^3/s	d^{-1}	d^{-1}	d^{-1}	mg/(l·d)	mg/(l·d)	mg/l	mg/l	km
1	19.5	3.8	0.95	3.89	0.2	1	4	0	0	8
2	19.5	4.94	0.95	3.17	0	1	4	100	8	3.2
3	37.2	4.94	0.95	2.30	0	1	1	0	0	6.4
4	26.0	4.94	0.95	5.67	0	1	-2	150	8	8
5	37.2	5.78	0.95	4.02	0	1	-2	0	0	4.8

始端上游河水的$Q_0 = 3.8m^3/s$，$D_0 = 0$，（水温$T = 28℃$），$L_0 = 0.305mg/l$。

求：（1）以0.8km为间隔，计算BOD和氧亏值，并绘制BOD、氧亏随流动距离的变化曲线。

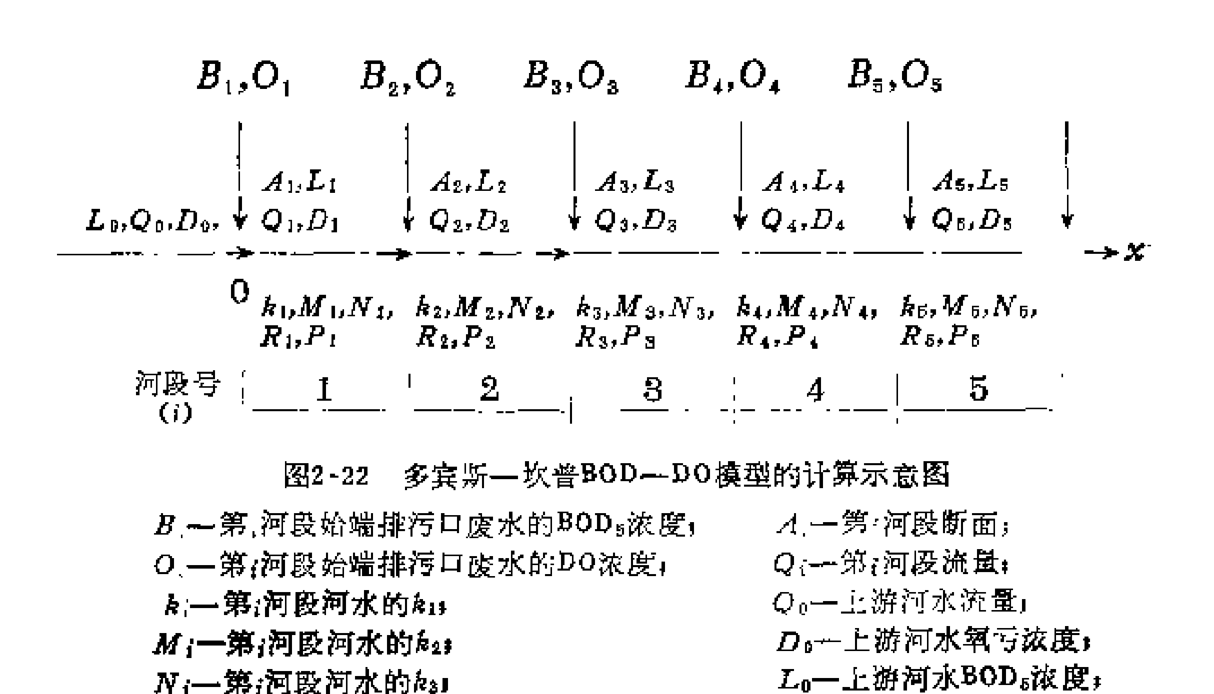


图2-22　多宾斯—坎普BOD—DO模型的计算示意图

B_i—第i河段始端排污口废水的BOD_5浓度；　　A_i—第i河段断面；

O_i—第i河段始端排污口废水的DO浓度；　　Q_i—第i河段流量；

k_i—第i河段河水的k_1；　　Q_0—上游河水流量；

M_i—第i河段河水的k_2；　　D_0—上游河水氧亏浓度；

N_i—第i河段河水的k_3；　　L_0—上游河水BOD_5浓度；

Li—各河段河水的BOD_5浓度；
Di—各河段河水的氧亏浓度。 } 需计算的变量（$i=1,\cdots,5$）

（2）河流中溶解氧亏超过5mg/l的河段及位置在何处？

解：用所编程序计算，结果如图22-23和表2-9可知氧亏超过5mg/l的河段位置在第3河段的0.8km处至第4河段的4.6km处之间（坐标距离为$x \doteq 12—21$km）。

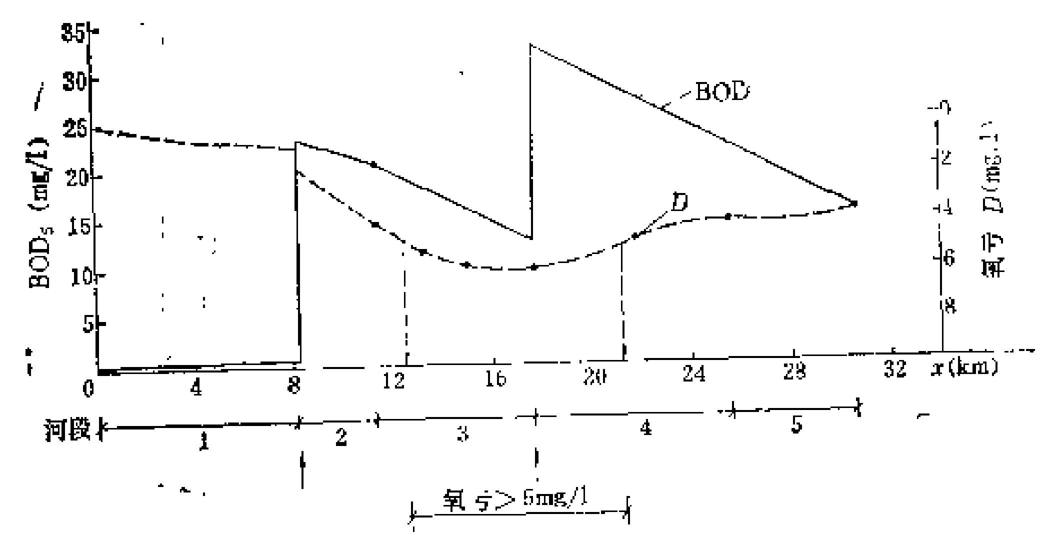


图2-23　用多宾斯-坎普BOD—DO模型预测计算的水质浓度变化曲线

表2-9　用多宾斯-坎普BOD-DO模型预测的水质结果

BOD mg/l	D(氧亏) mg/l	x (坐标) m
第 1 河 段		
0.3050	0.0000	0
0.3596	0.1872	0.8
0.4114	0.3451	1.6
0.4604	0.4784	2.4
0.5068	0.5911	3.2
0.5508	0.6867	4.0
0.5924	0.7680	4.8
0.6318	0.8371	5.6
0.6691	0.8962	6.4
0.7044	0.9468	7.2
0.7379	0.9903	8.0
第 2 河 段		
23.6445	2.6079	8.0
22.8735	3.2229	8.8
22.1288	3.7458	9.6
21.4096	4.1875	10.4
20.7149	4.5577	11.2
第 3 河 段		
20.7149	4.5577	11.2
19.4547	5.1745	12.0
18.2752	5.6254	12.8
17.1714	5.9397	13.6
16.1383	6.1421	14.4
15.1714	6.2534	15.2
14.2685	6.2910	16.0
13.4195	6.2695	16.8
12.6269	6.2011	17.6
第 4 河 段		
32.5911	6.4625	17.6
31.3676	6.1340	18.4
30.1915	5.8334	19.2
29.0610	5.5584	20.0
27.9744	5.2995	20.8
26.9300	5.0600	21.6
25.9261	4.8355	22.4
24.9611	4.6243	23.2
24.0335	4.4243	24.0
23.1420	4.2361	24.8
22.2850	4.0568	25.6
第 5 河 段		
22.2850	4.0568	25.6
21.1164	4.1776	26.4
20.0121	4.2156	27.2
18.9685	4.1914	28.0
17.9824	4.1214	28.8
17.0506	4.0181	29.6
16.1701	3.8915	30.4

$L_0 = 0.305 mg/l$

$D_0 = 0 mg/l$

二　一维稳态河段最大容许BOD排污量计算

（一）利用多宾斯–坎普BOD–DO模型推求临界氧亏距离、河水的起始容许BOD浓度和最大容许排污量公式

1．临界氧亏距离x_c公式（由2·73式推得）

$$x_c=\frac{u}{k_2-(k_1+k_3)}\ln\left\{\frac{k_2}{k_1+k_3}+\frac{k_2-(k_1+k_3)}{(k_1+k_3)L_0-R}\cdot\left(\frac{R}{k_1+k_3}-\frac{k_2D_0-P}{k_1}\right)\right\} \tag{2·165}$$

2．由规定的容许氧亏D_{max}计算排污口处河水容许BOD，L_0的（如下图）公式。（由2·73式推得）

$$Q_W,\ L_W,\ D_H$$

$$Q_s, L_s, D_s \rightarrow 0 \rightarrow \frac{D_0}{L_0} \rightarrow u, k_1, k_2, k_3, R, P\ \ D_{max}\ \ x_{max} \rightarrow x$$

容许BOD示意图

$$\begin{cases} L_0=\dfrac{D-\{P/k_2+k_1R/[k_2(k_1+k_3)]\}(1-F_2)-D_0F_2}{\{k_1/[k_2-(k_1+k_3)]\}(F_1-F_2)}+\dfrac{R}{k_1+k_3} \\ F_1=\exp\left(-\dfrac{(k_1+k_3)}{u}x\right) \\ F_2=\exp\left(-\dfrac{k_2}{u}x\right) \end{cases} \tag{2·166}$$

3．排污口最大容许BOD排污量公式

$$L_WQ_W=L_0(Q_S+Q_W)-L_SQ_S \tag{2·167}$$

$$L_W=\frac{L_0(Q_S+Q_W)-L_SQ_S}{Q_W} \tag{2·168}$$

式中： L_W——$x=0$ 处排放废水的BOD_5浓度。〔ML^{-3}〕；

Q_V——$x=0$ 处排放废水的流量〔L^3T^{-1}〕；

L_s——$x=0$ 处上游河水BOD_5浓度，〔ML^{-3}〕；

Q_s——$x=0$ 处上游河水流量，〔L^3T^{-1}〕。

（二）确在河流最大容许排污量的计算程序

1． 确定河水容许BOD浓度的计算程序

（1）根据规定的容许氧亏 D_{max}（$=D$）和河段长度x_{max}（$=x$），由方程2.166，计算出第1次的河水容许浓度L_{01}，〔$L_{01}=L_0$（D_{max}，x_{max}）〕。再由方程2.165计算出相应的临界氧亏距离x_{c1}，〔$x_{01}=x_0$（L_{01}）〕。

若$x_{01}>x_{max}$，因最大氧亏发生在该河段之外，故计算得到的L_{01}可作为容许浓度（留有环境容量的余量）即$L_{01}=〔L_0〕_{max}$。

（2）若$_{01}<x_{max}$，此时最大氧亏D_{01}发生在河段之内，且$D_{01}>D_{max}$，故需要降低排污口处河水浓度，使x_c处的$D_c\leqslant D_{cmax}$。可用迭代方法（见图2-24）

$$\left.\begin{array}{l}D_{max}=D\\ x_{c1}=x\end{array}\right\}\xrightarrow{\text{方程}(2\cdot166)}L_{02}\xrightarrow{\text{方程}(2\cdot165)}x_{c2},\ x_{c2}<x_{c1}$$

$$\left.\begin{array}{l}D\max=D\\ x_{c2}=x\end{array}\right\}\xrightarrow{\text{方程}(2\cdot166)}$$

$$L_{03}\xrightarrow{\text{方程}(2.165)}x_{c3},\ x_{c3}<x_{c2}$$

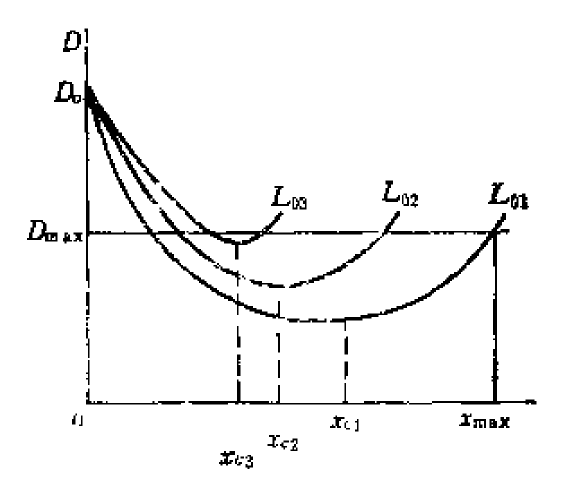


图2-24　D, L_0, x_c三者关系的示意图

直至　$x_{c(i)}\doteq x_{c(i-1)}$

即，　$x_{c(i)}-x_{c(i-1)}\leqslant\xi$

式中：ξ—容许的最大偏差。

此时，$L_{0(i)}=〔L_0〕_{max}$

（3）判别$x_{c(i)}$与$x_{c(i-1)}$的逻辑关系是

$$R \gtreqless \frac{k_1+k_3}{k_1}(k_2D_0-P),\quad x_c(i) \gtreqless x_c(i-1) \qquad (2\cdot167)$$

2. 河流最大容许BOD排污量的计算框图（见图2-25）

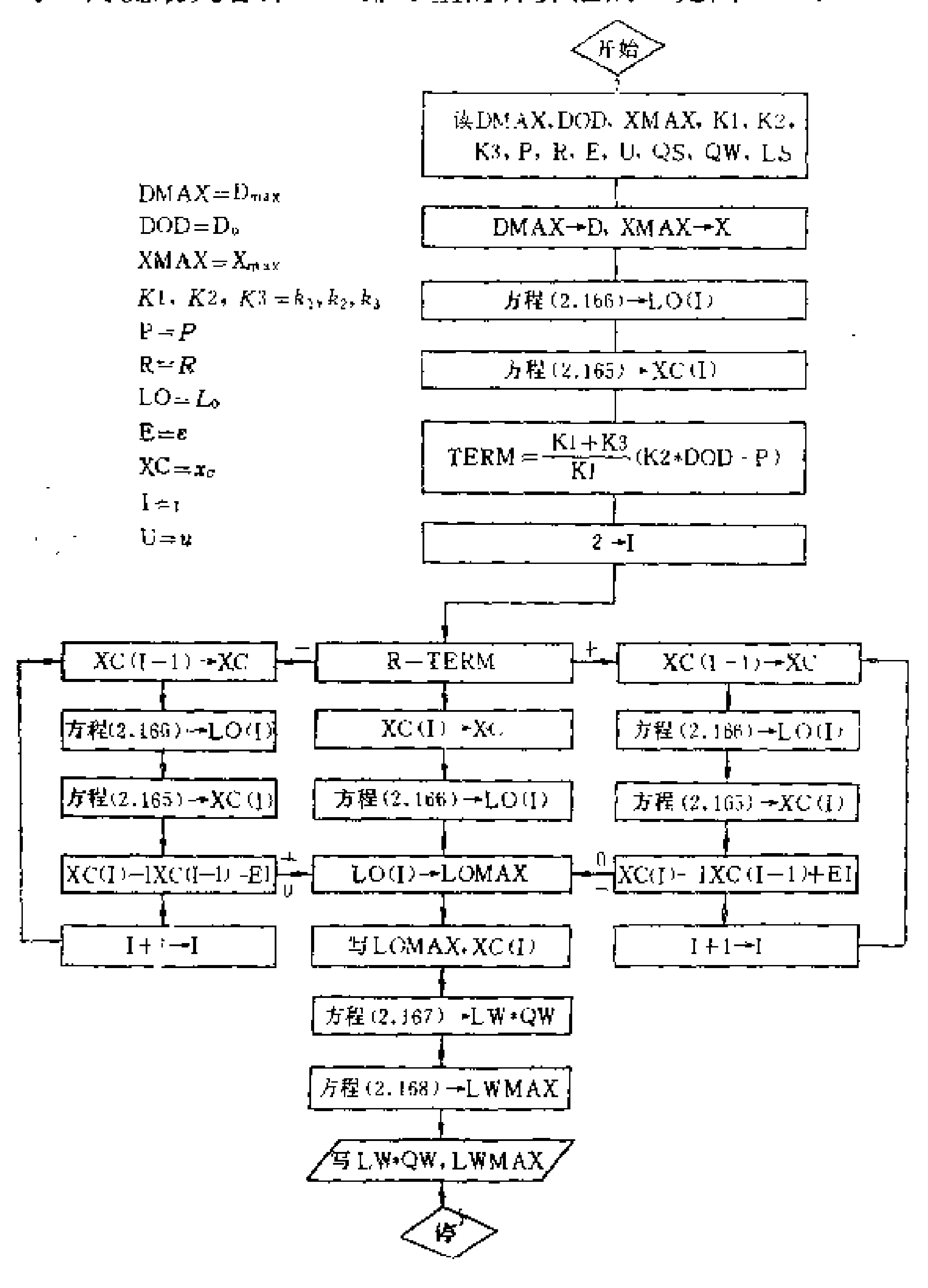


图2-25 河流最大容许BOD排污量的计算框图

【例题2-12】

已知$x_{max}=8km$，$k_1=0.95d^{-1}$，$k_2=5.67d^{-1}$，$_3k=0$，$P=-2$ mg/(l·d)，$R=1m/g$ (l·d)，$v=19.207km/d$，$D_0=0.847mg/l$，$Q_s=4.96m^3/s$，$Q_w=0.82m^3/s$，$L_s=0.791mg/l$，$L_w=250mg/l$，$D_s=0.821mg/l$，$D_w=1mg/l$。并规定河水的容许氧亏$D_{max}=2.852mg/l$，计算的容许偏差$\varepsilon=0.001$。求：（1）排污口处河水最大容许BOD，$[L_0]_{max}$？临界氧亏距离$x_0=$？（2）当河中藻类光合作用引起的氧亏变化率$P=2mg/(l·d)$（其它条件相同）时，$[L_0]_{max}$和x_0是多少？（3）排污口的最大容许BOD排污量、BOD的容许排放浓度和排污口的应削减率？

解：用所编程序可计算得到

（1）当$P=-2$ mg/（l·d）时

$[L_0]_{max}=25.775mg/l$，　　$x_0=6.333km$，

$(L_WQ_W)_{max}=145.059mg/l$　　$(L_W)_{max}=176.901mg/l$，

所以排污口BOD的应削减率＝29.2％。

（2）当$P=2mg/(l·d)$时

$[L_0]_{max}=20.581mg/l$，　　$x_0=6.927km$

$(L_WQ_W)_{max}=115.037mg/l$，　$(L_W)_{max}=140.289mg/l$

所以排污口BOD的应削减率＝43.8％

三　二维河段惰性污染物点源稳态排放的水质模拟计算

利用以下的二维河段惰性污染物点源稳态排放的水质模型可进行水质模拟计算。

一般水体

$$c(x,y)=\frac{W}{\bar{u}h\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\exp\left\{-\frac{\bar{u}y^2}{4D_yx}\right\} \tag{2·168}$$

边界处

$$c(x,y)=\frac{2W}{\bar{u}h\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{u}}}\exp\left\{-\frac{ub^2}{4D_{yx}}\right\}\tag{2·169}$$

式中：b——岸边离排污口的横向（y）坐标距离，〔L〕；

D_y——横向扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

$\bar{u}$——河流纵向（x）断面平均流速，〔LT^{-1}〕；

W——$x=0$处断面上污染物总量，〔M〕；

h——水深，〔L〕。

【例2-13】

在略有弯曲的宽阔河流的断面中心，有一工业排污口，稳定排污，废水流量为$0.2m^3/s$，废水中含有不易降解的有害物质，其浓度为100mg/l。河段水深为4.0m，河宽60m，流速1.0m/s，摩阻流速（$u^*=\sqrt{ghI}$）为0.061m/s。假定废水排出后，垂向完全混合，并已知横向扩散系数$D_y=0.4hu^*$，试计算在排放口下游400m处的污染扩散宽度与最大浓度。

解：

横向扩散系数$D_y=0.4hu^*=0.4\times4\times0.061=0.098m^2/s$。

定义污染的扩散宽度为4σ（见图2-6）。则排放口下游400m处的污染扩散宽度为

$$扩散宽度\quad L=4\sigma=4\sqrt{2D_y\frac{x}{u}}$$

$$=4\sqrt{2(0\cdot098)\left(\frac{400}{1}\right)}=35.4m$$

该断面中心线上最大浓度

$$c_{max}=\frac{W}{h\cdot\bar{u}\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\cdot\left[1+2\exp\left(-\frac{\bar{u}b^2}{4D_yx}\right)\right]$$

$$=0.225mg/l。$$

【例2-14】

在河道岸边稳定排放污水，河宽6.0m，水深0.5m，流速0.3m/s，河道粗糙系数 $n=0.03$，$D_y=0.16hu_*$。

求：污水到达对岸的纵向距离L_b（污水到达对岸定义为对岸的浓度达到起始断面最大浓度的5%）。

解：因系岸边排放，故二边反射时河水浓度为

$$c(x,y)=\frac{W}{\bar{u}h\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\left\{\exp\left(-\frac{\bar{u}y^2}{4D_yx}\right)\right.$$

$$\left.+\exp\left(\frac{-\bar{u}(2b-y)^2}{4D_yx}\right)\right\}$$

当$y=b$（河宽）时，按定义

$$c(x,b)=0.05\cdot c(x,0)$$

即，
$$\frac{2m}{\bar{u}\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\exp\left(-\frac{b^2\bar{u}}{4D_yx}\right)=0.05\frac{m}{\bar{u}\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}$$

得
$$-\frac{b^2\bar{u}}{4D_yx}=\ln\left(\frac{0.05}{2}\right)=-3.69$$

故到达对岸所需要的纵向距离

$$x=L_b=\frac{b^2\bar{u}}{(4)(3.69)D_y}=\frac{b^2u}{14.76D_y} \qquad (2\cdot170)$$

这是一个适于岸边排放的通用公式。

对于顺直河道的一般估计（$D_y=0.23hu^*$）

$$L_b=\frac{1.18b^2u}{4hu^*} \qquad (2.171)$$

按本例题给定的资料

$$u^*=\frac{\bar{u}\,n\sqrt{g}}{h^{1/6}}=\frac{(0.3)(0.03)(\sqrt{9.81})}{(0.5)^{1/6}}=0.0316$$

$D_y = 0.16hu^* = (0.16)(0.5)(0.0316) = 0.00253$

所以 $L_b = \frac{(6)^2(0.3)}{(14.76)(0.00253)} = 289.4\text{m}$

如果在野外测得污水到达对岸的距离 L_b、河宽b和平均流速$\bar{u}$，即可以求得横向扩散系数 D_y 。如果又知道河流的粗糙系数n（或水力坡降I），即可由$D_y = \alpha_y hu_*$，解出系数α_y。

【例2-15】

在一条顺直的河道一侧，有稳定的岸边排污口，该河宽50m，比降0.002。水深2.0m平均流速0.8/s，横向扩散系数 $D_y = 0.4hu^*$，求污染物质达到断面上完全混合的纵向距离（L_m）。完全混合的纵向距离L_m定义为：岸边最大浓度不大于最大起始浓度的5％处的距离。如果是在河流的中心排放，也即达到中心起始排放浓度c_0的5％之距离。

关于横向完全混合的距离L_m菲希尔（Fischer）曾进行了分析研究，得出了如下的半经验公式：

对岸边排放

$$L_m = \frac{0.1\bar{u}(2b)^2}{D_y} = \frac{0.4b^2\bar{u}}{D_y} \tag{2·172}$$

对顺直河道$D_y = 0.23hu_*$

$$L_m = \frac{(0.4)(b^2)(\bar{u})}{(0.23)(h)(u^*)} \approx \frac{1.74b^2\bar{u}}{hu^*} \tag{2·173}$$

对弯曲河道$D_y = 0.6hu^*$

$$L_m = \frac{0.4b^2\bar{u}}{0.6hu^*} = \frac{0.667b^2\bar{u}}{hu^*} \tag{2·174}$$

按本例所给资料

$$u^* = \sqrt{ghI} = \sqrt{(9.81)(2)(0.0002)} = 0.0626\text{m/s}$$

$$D_y = 0.4hu^* = (0.4)(2)(0.0626) = 0.05\text{m}^2/\text{s}$$

所以 $L_m = \frac{0.4b^2u}{D_y} = \frac{(0.4)(50)^2(0.8)}{0.05} = 1600\text{m}$

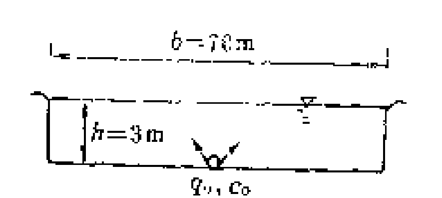
【例2-16】

某河中心有一排污口（见图2-26），污水流量（稳定）$q=0.5m^3/s$，不易降解物质浓度$c_0=600mg/l$。该河河宽70m，水深3m，河底比降$I=0.0001$，河道粗糙系数$n=0.025$，流量$Q=175m^3/s$，$D_y=0.6hu^*$。

试解下例两个问题

（1）污水场宽度 $2b'=?$ 〔宽度定义为$c(x,b')=0.05c(x,0)$〕。

（2）当污水扩散到全河宽，即$2b'=b$时，求该处离开排放口的距离L及中心最大浓度c_{max}。



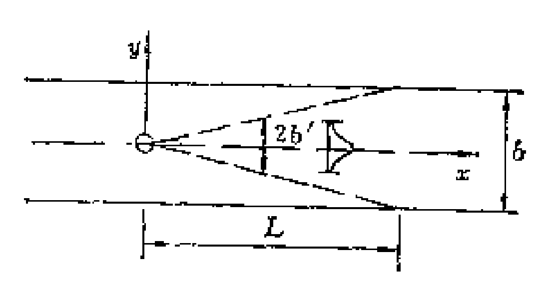


图2-26 河流中心排污的条件示意图

定义：t_z为竖向完全混合的时间，t_y为横向完全混合的时间。两者的比例：

$$\frac{t_z}{t_y}=\left(\frac{h}{b}\right)^2\frac{D_y}{D_z}$$

因 $D_z=0.067hu^*$，$D_y=0.6hu^*$，得$D_y\doteq10D_z$

$$\frac{t_z}{t_y}=\left(\frac{3}{70}\right)^2\left(\frac{10}{1}\right)=0.018=\frac{1}{54}$$

可见竖向扩散达到竖向混合均匀的时间很短，可以简化为混合均匀的线源。

解（1）：

采用二维平流扩散方程：

$$c(x,y)=\frac{\overline{W}}{h\bar{u}\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\bar{u}}}}\exp\left(-\frac{\bar{u}y^2}{4D_yx}\right)$$

$$u^*=\sqrt{ghI}=\sqrt{(9.81)(0.0001)(3)}=0.054m/s$$

$$D_y = 0.6hu^* = (0.6)(0.054)(3) = 0.097\text{m}^2/\text{s}$$

$$\overline{u} = \frac{Q}{A} = \frac{175}{(70)(3)} = 0.833\text{m/s}$$

因为 $c(x,b') = 0.05c(x,0)$

所以 $$\frac{c(x,b')}{c(x,0)} = \exp\left(-\frac{b'^2\overline{u}}{4D_yx}\right) = 0.05$$

将有关各值代入，可得污水场的宽度

$$2b' = 2.36\sqrt{x}$$

同上例相似，也可以根据实际观测的污染带宽度b'，反求D_y。

解（2）：

当污水扩散到全河宽时，河岸将产生反射作用，按一次完全反射上算：（参见图2-27）

$$c(x,y) \doteq \frac{\overline{W}}{\overline{u}h\sqrt{4\pi D_y\frac{x}{\overline{u}}}}\left\{\exp\left(-\frac{\overline{u}y^2}{4D_yx}\right)\right.$$

$$\left.+\text{epx}\left[-\frac{\overline{u}(b-y)^2}{4D_yx}\right]\right\}$$

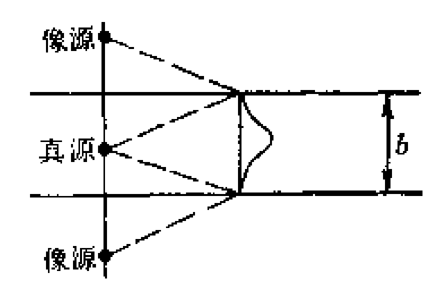


图2-27 污水扩散的两岸反射

此时$2b' = b$，故，

$$\frac{\overline{W}}{2h\sqrt{\pi D_y\overline{u}x}}\left\{\exp\left[-\frac{\overline{u}(35)^2}{4D_yx}\right]\right.$$

$$\left.+\text{epx}\left[-\frac{\overline{u}(70-35)^2}{4D_yx}\right]\right\} = 0.05\frac{\overline{W}}{2h\sqrt{\pi D_y\overline{u}x}}$$

$$\exp\left[-\frac{\overline{u}(35)^2}{4D_yx}\right] = \frac{0.05}{2} = 0.025$$

所以 $$x=\frac{(0.833)(35)^2}{(4)(0.097)(3.69)}=713\text{m}$$

扩散到对岸时，该断面的中心最大浓度

$$c_{max}=\frac{q_0c_0}{h\sqrt{4\pi D_y x u}}$$

$$=\frac{(0.05)(600)}{(3)\sqrt{(4\pi)(0.097)(713)(0.833)}}=3.72\text{mg/l}$$

可见，当污水扩散到全断面时，已稀释了160倍。如不考虑反射作用，则

$$x=\frac{\bar{u}(35)^2}{4D_y\cdot\ln(0.05)}=\frac{(0.833)(35)^2}{(4)(0.097)(2.996)}=878\text{mg/l}$$

误差达23％。

四 一维稳态河流的水质模拟计算

对于一条多河段的稳态河流，为了计算的方便可以对整条河流进行水质模拟。根据一维稳态河流的特点与沿程的输入、输出状态，可以用下图表达它的概念化模型

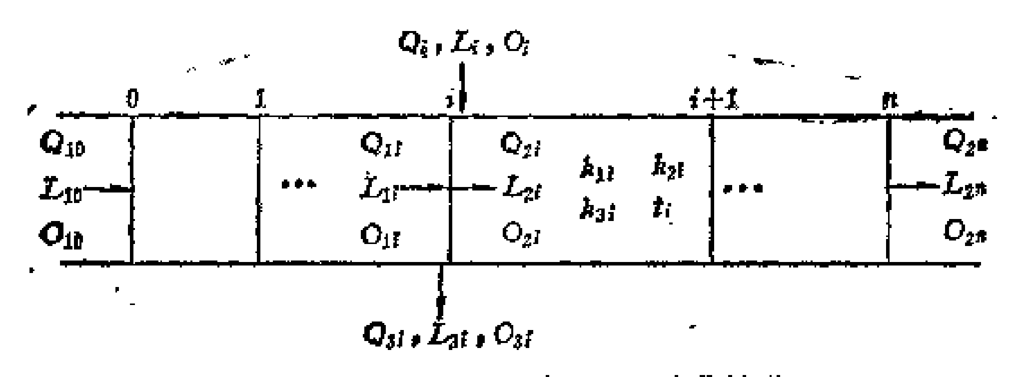


图2-28 一维稳态河流的概念化模型

图中：Q_i——节点 i 处注入河流的污水流量；

Q_{1i}——由上游流到断面 i 的河水流量；

Q_{2i}——由断面 i 向下游流出的河水流量；

Q_{3i}——在断面 i 处引走的流量；

L_i，O_i——断面 i 处注入河流的污水BOD与DO浓度；

L_{1i}，O_{1i}——由上游流到断面i的河水BOD与DO浓度；

L_{2i}，O_{2i}——由断面 i 向下游输出的河水BOD与DO浓度；

k_{1i}，k_{2i}，k_{3i}——由断面 i 至断面 $i+1$ 间的河流水质参数；

t_i——断面 i 至断面 $i+1$ 的河水流行时间。

河流断面 i 的输出河水水质（如L_{2i}），都可以看成是上游各断面与本身断面处排放污染物对该断面出水水质影响的总和。它可以用如下的线性多项式表示（以BOD为例）：

$$u_{1i}L_1 + u_{2i}L_2 + \cdots + u_{ii}L_i + e_{i0}L_{10} = L_{2i}$$

式中：u_{1i}，u_{2i}，…，u_{ii}——河流中BOD传递关系系数；

e_{i0}——起始断面BOD_5，L_{10}对第i断面 BOD_5 值的影响传递系数。

对河流各个节点可写出下述多项式

$$\begin{aligned}
&u_{11}L_1 &&+ e_{10}L_{10} = L_{21}\\
&u_{21}L_1 + u_{22}L_2 &&+ e_{20}L_{10} = L_{22}\\
&\vdots &&\vdots\\
&u_{i1}L_1 + u_{i2}L_2 + \cdots + u_{ii}L_i &&+ e_{i0}L_{10} = L_{2i}\\
&\vdots &&\vdots\\
&u_{n1}L_1 + u_{n2}L_2\cdots + \cdots + u_{ii}L_i + \cdots u_{nn}L_n &&+ e_{n0}L_{10} = L_{2n}
\end{aligned}$$

由上述一系列递推迭加式，可写出关于BOD的矩阵方程

$$\mathbf{U}\vec{L} + \vec{m} = \vec{L}_2 \qquad (2\cdot175)$$

同样还可推得关于溶解氧DO的矩阵方程：

$$\mathbf{V}\vec{L} + \vec{n} = \vec{O}_2 \qquad (2\cdot176)$$

式中：$\vec{L} = (L_1, L_2, \cdots, L_n)^T$是由各节点输入河流断面的污水$BOD_5$值组成的$n$维列向量；

$\vec{O} = (O_1, O_2, \cdots, O_n)^T$ 由各节点输入的污水DO值组成的n维列向量；

$\vec{L}_2 = (L_{21}, L_{22}, \cdots, L_{2n})^T$是由河流各断面向下游输出的$BOD_5$值组成的$n$维列向量；

$\vec{O_2}=(O_{21}, O_{22}, \cdots, L_n)^T$ 是由河流各断面向下游输出的DO值组成的 n 维列向量；

$$\vec{m}=(m_1, m_2, \cdots, m_n)^T$$

$$\vec{n}=(n_1, n_2, \cdots, n_n)^T,$$

代表起始断面水质对下游各断面BOD_5和DO值影响的向量；

U，V——河流的BOD和DO稳态响应矩阵，

$$U=\begin{pmatrix} u_{11} & & & & \\ u_{21} & u_{22} & & & \\ \vdots & & & & \\ u_{i1} & u_{i2} & \cdots & u_{ii} & \\ \vdots & & & & \\ u_{n1} & u_{n2} & \cdots & u_{ni} & \cdots u_{nn} \end{pmatrix}, \quad V=\begin{pmatrix} v_{11} & & & & \\ v_{21} & v_{22} & & & \\ \vdots & & & & \\ v_{i1} & v_{i2} & \cdots & v_{ii} & \\ \vdots & & & & \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{ni} & \cdots v_{nn} \end{pmatrix}。$$

U、V 都是一个 $n\times n$ 阶的下三角矩阵。若能算出此二个稳态响应矩阵，即可建立起整个河流各断面输入一组BOD和 DO（$\vec{L}$和$\vec{O}$）值与河流各断面河水一组BOD和DO（$\vec{L_2}$和$\vec{O_2}$）值的关系。

（一）河流BOD的模拟

斯特里特-菲尔普斯方程的积分形式为

$$\begin{cases} L(t)=L_0e^{-k_1t} \\ O(t)=O_0e^{-k_2t}-\dfrac{k_1L_0}{k_2-k_1}(e^{-k_1t}-e^{-k_2t}) \\ \qquad +O_s(1-e^{-k_2t}) \end{cases}$$

若采用斯特里特-菲尔普斯方程来表达由 $i-1$ 断面到 i 断面间BOD的衰减变化和河水的复氧变化关系，则

$$\begin{cases} L_{1i}=L_{2,i-1}\ e^{-k_{1,i-1}t_{i-1}} \\ O_{1i}=O_{2,i-1}e^{-k_{2,i-1}t_{i-1}}-\dfrac{k_{1,i-1}L_{2,i-1}}{k_{2,i-1}-k_{1,i-1}} \end{cases}$$

$$\cdot(e^{-k_{1,i-1}t_{i-1}}-e^{-k_{2,i-1}t_{i-1}})+O_s(1-e^{-k_{2,i-1}t_{i-1}})$$

（2·177）

$$\alpha_i = e^{-k_{1,i} t_i} \tag{2·178}$$

$$\gamma_i = e^{-k_{2,i} t_i} \tag{2·179}$$

$$\beta_i = \frac{k_{1,i}(\alpha_i - \gamma_i)}{k_{2,i} - k_{1,i}} \tag{2·180}$$

$$\delta_i = O_s(1 - \gamma_i) \tag{2·181}$$

则方程（2·177）可简写成

$$L_{1i} = L_{2,i-1}\alpha_{i-1} \tag{2·182}$$

$$O_{1i} = O_{2,i-1}\gamma_{i-1} - L_{2,i-1}\beta_{i-1} + \delta_{i-1} \tag{2·183}$$

同时，按水流连续性原理，可写出各节点的流量Q、BOD和DO的如下各平衡关系

$$Q_{2i} = Q_{1i} - Q_{3i} + Q_i \tag{2·184}$$

$$Q_{1i} = Q_{2,i-1} \tag{2·185}$$

$$L_{2i}Q_{2i} = L_{1i}(Q_{1i} - Q_{3i}) + L_iQ_i \tag{2·186}$$

$$O_{2i}Q_{2i} = O_{1i}(Q_{1i} - Q_{3i}) + O_iQ_i \tag{2·187}$$

由式（2·182)和(2·186）可写出

$$L_{2i} = \frac{Q_{1i}L_{1i} - Q_{3i}L_{1i} + Q_iL_i}{Q_{2i}}$$

$$= \frac{L_{2,i-1}\alpha_{i-1}(Q_{1i} - Q_{3i})}{Q_{2i}} + \frac{Q_i}{Q_{2i}}L_i \tag{2·188}$$

令 $$a_{i-1} = \frac{\alpha_{i-1}(Q_{1i} - Q_{3i})}{Q_{2i}} \tag{2·189}$$

$$b_i = \frac{Q_i}{Q_{2i}} \tag{2·190}$$

由式（2·188）、（2·189）和（2·190）可写出任一断面处BOD值与上游各节点和本节点处输入河流BOD值之间的如下一系列递推关系式

$$L_{21} = a_0L_{20} + b_1L_1$$

$$L_{22}=a_1L_{21}+b_2L_2$$
$$\vdots \qquad \vdots$$
$$L_{2i}=a_{i-1}L_{2,i-1}+b_iL_i$$
$$\vdots \qquad \vdots$$
$$L_{2n}=a_{n-1}L_{2,n-1}+b_nL_N$$

上述这组递推式子，可用如下的矩阵方程式来表达

$$\mathrm{A}\vec{L}_2=\mathrm{B}\vec{L}+\vec{g} \tag{2·191}$$

式中：$\vec{L}$，$\vec{L}_2$——由各节点输入河流的各断面的BOD值和各断面向下游输出的BOD值组成的n维列向量；

$\vec{g}$——表征起始断面输出BOD值的n维列向量，$g=(g_1, 0, \cdots, 0)^T$，

$g_1=a_0L_{20}$；

A，B——$n\times n$阶矩阵，

$$\mathrm{A}=\begin{pmatrix}1 & & & \\ -a_1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -a_{n-1} & 1\end{pmatrix},\quad \mathrm{B}=\begin{pmatrix}b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & b_n\end{pmatrix}。$$

$|\mathrm{A}|\neq 0$，A的逆阵存在，由式（2·191）可导出

$$\vec{L}_2=\mathrm{A}^{-1}\mathrm{B}\vec{L}+\mathrm{A}^{-1}\vec{g} \tag{2·192}$$

矩阵方程（2·192）表示了各断面河水输出的BOD值（$\vec{L}_2$）与各节点输入河流的BOD值（$\vec{L}$）之间的关系。水质模拟即是在$\vec{L}$已知条件下，模拟计算$\vec{L}_2$。

（二）河流溶解氧的模拟

由式（2·183）和（2·187）得

$$O_{2i}=\frac{Q_{1i}-Q_{3i}}{Q_{2i}}(O_{2,i-1}\gamma_{i-1}-L_{2,i-1}\beta_{i-1}+\delta_{i-1})$$

$$+\frac{Q_i}{Q_{2i}}O_i \tag{2·193}$$

令 $$c_{i-1}=\frac{Q_{1i}-Q_{3i}}{Q_{2i}}\gamma_{i-1} \tag{2·194}$$

$$d_{i-1}=\frac{Q_{1i}-Q_{3i}}{Q_{2i}}\beta_{i-1} \tag{2·195}$$

$$f_{i-1}=\frac{Q_{1i}-Q_{3i}}{Q_{2i}}\delta_{i-1} \tag{2·196}$$

则式（2·193）可简写成

$$O_{2i}=c_{i-1}O_{2,i-1}-d_{i-1}L_{2,i-1}+f_{i-1}+b_iO_i \tag{2·197}$$

与BOD矩阵方程的推导类似，可写出上式的一组递推方程，并写出以下的矩阵方程

$$\mathbf{C}\vec{O}_2=-\mathbf{D}\vec{L}_2+\mathbf{B}\vec{O}+\vec{f}+\vec{h} \tag{2·198}$$

式中，$\vec{O}$，$\vec{O}_2$——河流各节点处输入的污水的DO值和由河流各断面向下游输出的DO值组成的n维列向量；

$\vec{f}$，$\vec{h}$——表征起始条件影响的n维列向量。

$$\vec{f}=(f_0,f_1,\cdots,f_{n-1})^{\mathrm{T}} \tag{2·199}$$

$$\vec{h}=(h_1,0,\cdots,0)^T \tag{2·200}$$

$$h_1=c_0O_{20}-d_0L_{20} \tag{2·201}$$

将式（2.192）BOD矩阵方程式代入式（2.198）

$$\vec{O}_2=\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}\vec{O}-\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\vec{L}+\mathbf{C}^{-1}(\vec{f}+\vec{h})$$

$$-\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\vec{g} \tag{2·202}$$

令 $$U=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \tag{2·203}$$

$$V = -C^{-1}DA^{-1}B \tag{2·204}$$

$$\vec{m} = A^{-1}\vec{g} \tag{2·205}$$

$$\vec{n} = C^{-1}B\vec{O} + C^{-1}(\vec{f} + \vec{h}) - C^{-1}DA^{-1}\vec{g} \tag{2·206}$$

可得

$$\vec{L}_2 = U\vec{L} + \vec{m} \tag{2·207}$$

$$\vec{O}_2 = V\vec{L} + \vec{n} \tag{2·208}$$

式中：U——河流的BOD稳态响应矩阵，是$n\times n$阶下三角矩阵；

V——河流的DO稳态响应矩阵，是$n\times n$阶下三角矩阵；

$\vec{m}$，$\vec{n}$——两个n维向量。

在给定数据下计算得U、V、$\vec{m}$和$\vec{n}$，对每一组输入的BOD($\vec{L}$)值，即可模拟计算得一组相应的河流各断面的BOD和DO输出值($\vec{L}_2$和$\vec{O}_2$)。

（三）含有支流的河流水质模拟

若需要对含有支流的河流作整体考虑，同时表达其相互关系，则可对支流写出与方程2·207和方程2·208类似的矩阵方程，然后取该矩阵方程的最底行（即支流汇入主流处的水质），代入主流矩阵方程的相应位置，作为主流的一个变化输入，形成新的矩阵方程。

设含支流的河流系统如图2-29主流上有n个节点。支流上有m个节点。其汇入点为i。则新的BOD与DO响应矩阵是一个$n\times(n+m)$阶矩阵。

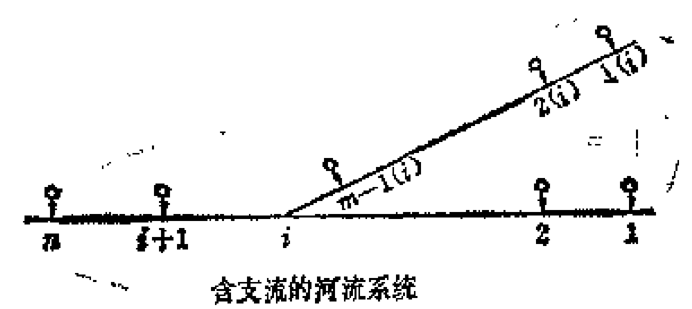


图2-29 含支流的河流系统

主流与支流的BOD和DO矩阵方程为

$$\vec{L}_2 = \mathbf{U}\vec{L} + \vec{m} \tag{2·209}$$

$$\vec{O}_2 = \mathbf{V}\vec{L} + \vec{n} \tag{2·210}$$

$$\vec{L}_2' = \mathbf{U}'\vec{L}' + \vec{m}' \tag{2·211}$$

$$\vec{O}_2' = \mathbf{V}'\vec{L}' + \vec{n}' \tag{2·212}$$

式中凡带有（′）的字母均代表支流的有关向量和矩阵。以 BOD 矩阵方程为例将其展开得如下表达式

$$\begin{pmatrix} L_{21} \\ L_{22} \\ \vdots \\ L_{2i} \\ \vdots \\ L_{2n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & & & \\ u_{21} & u_{22} & & \\ u_{i1} & u_{i2} & u_{ii} & \\ u_{n1} & u_{n2} \cdots & u_{ni} & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_i \\ \vdots \\ L_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_i \\ \vdots \\ m_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} L_{21}' \\ L_{22}' \\ \vdots \\ L_{2j}' \\ \vdots \\ L_{2m}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11}' & & & \\ u_{21}' & u_{22}' & & \\ \vdots & & & \\ u_{j1}' & u_{j2}' & \cdots u_{jj}' & \\ \vdots & & & \\ u_{m1}' & u_{m2}' & \cdots u_{mj}' & \cdots u_{mm}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1' \\ L_2' \\ \vdots \\ L_j' \\ \vdots \\ L_m' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_1' \\ m_2' \\ \vdots \\ m_j' \\ \vdots \\ m_m' \end{pmatrix}$$

支流入主流的汇入点，i 处

$$L_i = L_{2m}' = u_{m1}'L_1' + u_{m2}'L_2' + \cdots + u_{mj}'L_j' + \cdots + u_{mm}'L_m' + m_m' \tag{2·213}$$

此时主流的矩阵方程可写作

$$\begin{pmatrix} L_{21} \\ L_{22} \\ \vdots \\ L_{2i} \\ \vdots \\ L_{2n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & u_{ij} & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \vdots \\ L_{2m}' \\ \vdots \\ L_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_i \\ \vdots \\ m_n \end{pmatrix}$$

综合式（2.209）和（2.213）可写成

$$\vec{L}_2 = U''\vec{L}'' + \vec{m} \qquad (2\cdot214)$$

式中： U''——$n\times(n+m+1)$ 阶矩阵；

$$U''=\begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{21} & u_{22} \\ \vdots \\ u_{i1} & u_{i2}\cdots u_{i,i-1} & u_{ii}\cdot(u'_{m1}\cdots u'_{mj}\cdots u'_{mm} \ \ 1) \\ \vdots \\ u_{n1} & u_{n2}\cdots u_{n,i-1} & u_{ni}\cdot(u'_{m1}\cdots u'_{mj}\cdots u'_{mm} \ \ 1) & u_{n,i+1}\cdots u_{nn} \end{pmatrix} \qquad (2\cdot215)$$

$\vec{L}''$——$(n+m)$ 维向量；

$$\vec{L}'' = (L_1 \ L_2\cdots L'_1 \ L'_2\cdots L'_m \ m'_m L_{i+1}\cdots L_n)^T \qquad (2\cdot216)$$

支流矩阵方程的底行 L'_{2m} 可以通过引入一个 m 维向量乘子 $\lambda^T=(0\ 0\cdots 0\ 1)$ 来计算

$$L'_{2m} = \lambda^T(U'\vec{L}' + \vec{m}')$$

以上介绍的是单支流情况的BOD模拟方程的推导。对单支流条件下的DO模拟方程和多支流条件下的BOD和DO模拟方程亦可以类推。

【例题2-17】一条四段河流其原始数据见图2-30河水的饱和溶解氧浓度 $O_s=10$mg/l。要求进行BOD和DO的一维水质模拟计算。

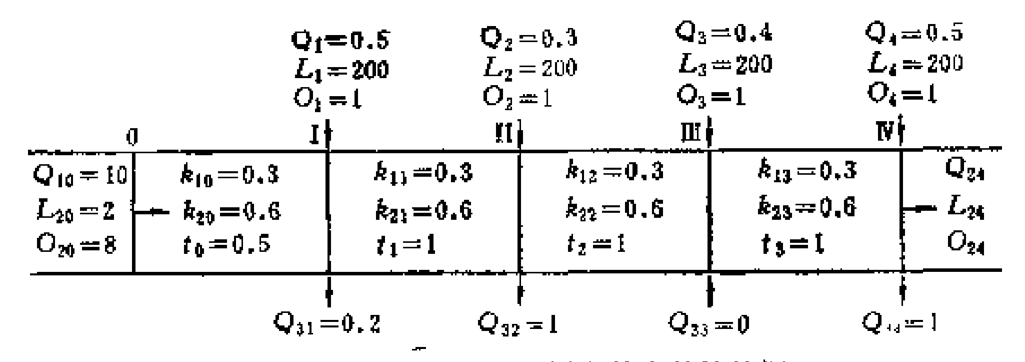


图2-30 四段河流的排污条件和特性数据

Q——m³/s； L——mg/l； O——mg/l； k_1——d⁻¹； k_2——d⁻¹； t——d。

解：

（1）计算矩阵A、B、C、D的元素

$$\alpha_0 = e^{-k_{10}t_0} = e^{-0.3\times0.5} = 0.8607$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = e^{-0.3\times1} = 0.7408$$

$$\gamma_0 = e^{-k_{20}t_0} = e^{-0.6\times0.5} = 0.7408$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = e^{-0.6\times1} = 0.5488$$

$$\beta_0 = \frac{k_{10}(\alpha_0 - \gamma_0)}{k_{20} - k_{10}} = \frac{0.3(0.8607 - 0.7408)}{0.6 - 0.3} = 0.0681$$

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \frac{0.3(0.7408 - 0.5408)}{0.6 - 0.3} = 0.1920$$

$$\delta_0 = O_s(1 - \gamma_0) = 10(1 - 0.7408) = 2.5920$$

$$\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 10(1 - 0.5488) = 4.5120$$

$$a_0 = \frac{\alpha_0(Q_{11} - Q_{31})}{Q_{21}} = \frac{0.8607(10 - 0.2)}{10 - 0.2 + 0.5} = 0.8189$$

$$a_1 = \frac{\alpha_1(Q_{12} - Q_{32})}{Q_{22}} = \frac{0.7408(10.3 - 1)}{10.3 - 1 + 0.3} = 0.7176$$

$$a_2 = \frac{\alpha_2(Q_{13} - Q_{33})}{Q_{23}} = \frac{0.7408(9.6 - 0)}{9.6 + 0.4} = 0.7112$$

$$a_3 = \frac{\alpha_3(Q_{14} - Q_{34})}{Q_{24}} = \frac{0.7408(10 - 1)}{10 - 1 + 0.5} = 0.7018$$

$$b_1 = \frac{Q_1}{Q_{21}} = \frac{0.5}{10.3} = 0.04854$$

$$b_2 = \frac{Q_2}{Q_{22}} = \frac{0.3}{9.6} = 0.03125$$

$$b_3 = \frac{Q_3}{Q_{23}} = \frac{0.4}{10} = 0.0400$$

$$b_4 = \frac{Q_4}{Q_{24}} = \frac{0.5}{9.5} = 0.05263$$

$$c_0 = \frac{\gamma_0(Q_{11} - Q_{31})}{Q_{21}} = \frac{0.7408(10 - 0.2)}{10 - 0.2 + 0.5} = 0.7048$$

$$c_1 = \frac{\gamma_1(Q_{12} - Q_{32})}{Q_{22}} = \frac{0.5488(10.3 - 1)}{10.3 - 1 + 0.3} = 0.5317$$

$$c_2 = \frac{\gamma_2(Q_{13} - Q_{33})}{Q_{23}} = \frac{0.5488(9.6 - 0)}{9.6 + 0.4} = 0.5268$$

$$c_3 = \frac{\gamma_3(Q_{14} - Q_{34})}{Q_{24}} = \frac{0.5488(10 - 1)}{10 - 1 + 0.5} = 0.5199$$

$$d_0 = \frac{\beta_0(Q_{11} - Q_{31})}{Q_{21}} = \frac{0.0681(10 - 0.2)}{10 - 0.2 + 0.5} = 0.06479$$

$$d_1 = \frac{\beta_1(Q_{12} - Q_{32})}{Q_{22}} = \frac{0.1920(10.3 - 1)}{10.3 - 1 + 0.3} = 0.1860$$

$$d_2 = \frac{\beta_2(Q_{13} - Q_{33})}{Q_{23}} = \frac{0.1920(9.6 - 0)}{9.6 - 0 + 0.4} = 0.1843$$

$$d_3 = \frac{\beta_3(Q_{14} - Q_{34})}{Q_{24}} = \frac{0.1920(10 - 1)}{10 - 1 + 0.5} = 0.1819$$

$$f_0 = \frac{\delta_0(Q_{11} - Q_{31})}{Q_{21}} = \frac{2.5920(10 - 0.2)}{10 - 0.2 + 0.5} = 2.4662$$

$$f_1 = \frac{\delta_1(Q_{12} - Q_{32})}{Q_{22}} = \frac{4.5120(10.3 - 1)}{10.3 - 1 + 0.3} = 4.3710$$

$$f_2 = \frac{\delta_2(Q_{13} - Q_{33})}{Q_{23}} = \frac{4.5120(9.6 - 0)}{9.6 - 0 + 0.4} = 4.3315$$

$$f_3 = \frac{\delta_3(Q_{14} - Q_{34})}{Q_{24}} = \frac{4.5120(10 - 1)}{10 - 1 + 0.5} = 4.2745$$

$$g_1 = a_0 L_{20} = 0.8189 \times 2 = 1.6378$$

$$h_1 = c_0 o_{20} - d_0 L_{20} = 0.7048 \times 8 - 0.06479 \times 2 = 5.5088$$

(2)计算U、V和$\vec{m}$、$\vec{n}$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -a_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -a_2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -a_3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -0.7176 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7112 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -0.7018 & 1 \end{bmatrix}$$

$$B=\begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.04854 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.03125 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0400 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.05263 \end{pmatrix}$$

$$C=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -c_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -c_2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -c_3 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -0.5317 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5268 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -0.5199 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.1860 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1843 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1819 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & 1 & 0 & 0 \\ a_1a_2 & a_2 & 1 & 0 \\ a_1a_2a_3 & a_2a_3 & a_3 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.7176 & 1 & 0 & 0 \\ 0.5104 & 0.7112 & 1 & 0 \\ 0.3582 & 0.4991 & 0.7018 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ c_1 & 1 & 0 & 0 \\ c_1c_2 & c_2 & 1 & 0 \\ c_1c_2c_3 & c_2c_3 & c_3 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.5317 & 1 & 0 & 0 \\ 0.2801 & 0.5268 & 1 & 0 \\ 0.1456 & 0.2739 & 0.5199 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{g}=(g_1\ 0\ 0\ 0)^T=(1.6378\quad 0\quad 0\quad 0)^T$$

$$\vec{f}=(f_0 f_1 f_2 f_3)^T=(2.4662\quad 4.3710\quad 4.3315\quad 4.2715)^T$$

$$\vec{h}=(h_1\ 0\ 0\ 0)^T=(5.4102\quad 0\quad 0\quad 0)^T$$

$$U=A^{-1}B=\begin{pmatrix} 0.04854 & 0 & 0 & 0 \\ 0.03483 & 0.03125 & 0 & 0 \\ 0.02477 & 0.02223 & 0.0400 & 0 \\ 0.01739 & 0.01560 & 0.02807 & 0.05263 \end{pmatrix}$$

$$V = -C^{-1}DU = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0.00903 & 0 & 0 & 0 \\ -0.01118 & -0.005759 & 0 & 0 \\ -0.01032 & -0.007038 & -0.007276 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{m}A^{-1}\vec{g} = (1.6378\ \ 1.1753\ \ 0.8359\ \ 0.5867)^T$$

$$\vec{n} = C^{-1}B\vec{O} + C^{-1}(\vec{f} + \vec{h}) - C^{-1}DA^{-1}\vec{g}$$

$$= (7.9253\ \ 8.3110\ \ 8.5335\ \ 8.6118)^T$$

（8）水质模拟

$$\vec{L}_2 = U\vec{L} + \vec{m} = (11.35\ \ 14.39\ \ 18.24\ \ 23.32)^T$$

$$\vec{O}_2 = V\vec{L} + \vec{n} = (7.93\ \ 6.51\ \ 5.15\ \ 3.69)^T$$

【例2-18】一个四段河流的BOD_5和DO的水质模拟。河段数较少时，这项工作可以通过手算来完成，但在河段数增加时，计算工作量将激剧增加，需借助计算机计算。例如对一条径流量为$5.49m^3/s$的河流，上游断面$BOD_5 = 4$ mg/l，DO = 8 mg/l，若该河流分为10个河段，共有11个节点，（其中9个污水排放口）原污水 $BOD_5 = 200$mg/l，BOD_5 衰减速率 $k_1 = 0.3d^{-1}$，复氧速率 $k_2 = 0.7d^{-1}$，水温$T = 20$℃。采用按本节叙述的计算过程编制计算

表2-10 水质模拟结果

节点	污水流量 m^3/s	污水处理程度	河流BOD_5 (mg/l)	河流DO (mg/l)
1	1.5	0.85	9.56126	6.49111
2	0.203	0.85	9.8861	6.01857
3	1.29	0.85	14.4041	4.79474
4	0.095	0.85	14.1785	4.58647
5	0.335	0.85	15.0043	4.30111
6	0.095	0.85	14.6597	4.10349
7	0.095	0.85	13.7826	3.85148
8	1.53	0.85	17.5344	3.10468
9	0	0	16.8638	2.98266
10	0.217	0.85	15.5288	2.72399
11	0	0	14.1497	2.72426

机程序，在计算速度为50万次 /s 的计算机上，仅须2—3分钟即可输出如表2-10的计算结果。

（四）临界点的校核

以上的水质模拟计算适用于两个计算断面之间不产生氧垂的情形，对河段长度较短的条件一般可以满足。如果所研究的河段较长，在两个计算断面之间有可能出现氧亏值更大的氧垂点，对此必须进行校核。

临界点与临界DO浓度可以用下式计算

$$x_c = \frac{\mu_i}{k_{2i}-k_{1i}}\ln\left\{\frac{k_{2i}}{k_{1i}}\left[1+\left(\frac{k_{2i}}{k_{1i}}-1\right)\left(\frac{O_s-O_{2i}}{L_{2i}}\right)\right]\right\} \tag{2·217}$$

$$O_c = O_s - \frac{L_{2i}k_{1i}}{k_{2i}}\left\{\frac{k_{2i}}{k_{1i}}\left[1-\left(\frac{k_{2i}}{k_{1i}}-1\right)\left(\frac{O_s-O_{2i}}{L_{2i}}\right)\right]\right\}^{\frac{k_{1i}}{k_{1i}-k_{2i}}} \tag{2·218}$$

式中：　符号意义与本节所介绍的一致。L_{2i}和O_{2i}分别为i断面的BOD模拟值与DO模拟值。

五　一维河流有限差分水质模型的模拟计算

（一）隐式差分方程模型

当一维河流的BOD基本方程为

$$\frac{\partial L}{\partial t}+u\frac{\partial L}{\partial x} = E\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}-(k_1+k_3)L+R \tag{2·219}$$

式中：　L——BOD_5浓度；

R——底泥释放BOD_5的速率系数；

E——弥散系数；

k_1, k_3——BOD_5衰减系数与BOD沉浮系数。

应用隐式差分格式解（2·124），可将式（2·219）转为如下的差分矩阵方程式

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & & \\ & \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3 & \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & & \alpha_n' & \beta_n' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \\ \vdots \\ L_{n-1} \\ L_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \delta_3 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \quad (2\text{·}220)$$

式中： $\alpha_i = -\frac{E_i}{\Delta x^2}$；

$\beta_i = \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{2E_i}{\Delta x^2} - \frac{u_i}{\Delta x} + k_{1i} + k_{3i}\right)$；

$\gamma_i = \left(\frac{u_i}{\Delta x} - \frac{E_i}{\Delta x^2}\right)$；

$\delta_i = \frac{L_i^j}{\Delta t} + R_i$；

$\delta_1' = \delta_1 + \frac{E_1}{\Delta x^2} L_0^{j+1}$；

$\alpha_n' = \alpha_n - \gamma_n$；

$\beta_n' = \beta_n + 2\gamma_n$

j——时间号，（$j = 1, \cdots, m$）；

i——河段单元号，（$i = 1, \cdots, n$）；

Δx——河段单元距离；

Δt——时间间隔单元。

当一维河流的DO基本方程为

$$\frac{\partial O}{\partial t} + u\frac{\partial O}{\partial x} = E\frac{\partial^2 O}{\partial x^2} - k_1 L + k_2(O_s - O) + P \quad (2\text{·}221)$$

$$= E\frac{\partial^2 O}{\partial x^2} - k_2 O + (k_2 O_s - k_1 L + P)$$

式中： O——溶解氧浓度；

k_1——BOD_5耗氧系数；

k_2——复氧系数；

P——藻类光合作用速率系数；

O ——饱和溶解氧浓度；

E——弥散系数。

应用隐式差分格式解，可将式（2.221）转为如下的差分矩阵方程

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & & \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & & \\ & \alpha_3 & \beta_3 & \gamma_3 & \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & & \alpha_n' & \beta_n' & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O_1 \\ O_2 \\ O_3 \\ \vdots \\ O_{n-1} \\ O_n \end{pmatrix}^{j+1} = \begin{pmatrix} \delta_1' \\ \delta_2 \\ \delta_3 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \qquad (2\cdot222)$$

式中： $\alpha_i = -\dfrac{E_i}{\Delta x^2}$；

$$\beta_i = \left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{2E_i}{\Delta x^2} - \frac{u_i}{\Delta x} + k_{2i}\right);$$

$$\gamma_i = \left(\frac{u_i}{\Delta x} - \frac{E_i}{\Delta x^2}\right);$$

$$\delta_i = \frac{O_i^j}{\Delta t} + k_{2i} O_s - k_{1i} L_i + P_i;$$

$$\delta_1' = \delta_1 + \frac{E_1}{\Delta x^2} O_0^{j+1};\quad \alpha_n' = \alpha_n - \gamma_n;\quad \beta_n' = \beta_n + 2\gamma_n$$

【例题2-19】

设在时间$t=0$到$t=1$小时内，因偶然事故均匀排放BOD_5，使河水起始断面$L0$为10mg/l，河段平均流速为5 km/h，纵向弥散系数$E=2\ km^2/h$，$k_1=0.015/h^{-1}$，求解$L(x,t)$。

解：

起始断面BOD_5浓度

$$L(0,t)=\begin{cases}10\ \ \text{mg/l} & 0\leqslant t\leqslant 1\text{小时}\\ 0 & t>1\text{小时}\end{cases}$$

其它各断面起始值

$L(x,0)=0$

$$\left.\begin{array}{ll}\text{时间步长取} & \Delta t=0.2\text{h}\\ \text{距离步长取} & \Delta x=1\text{km}\end{array}\right\}\ \frac{\Delta t}{\Delta x}=\frac{1}{u}$$

将已知数值代入式（2.220）。

并使：　$\alpha_i=\alpha$，　$\beta_i=\beta$，　$\gamma_i=\gamma$，

$E_i=E$，　$k_{1i}=k_1$，　$u_i=u$，　$R_i=0$，　$k_{3i}=0$

经上机计算得如表2-11的结果。

表2-11　不同时间、不同流动距离下的河水BOD浓度（mg/l）

时　间 t(h)	流动距离x （Km）								
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	10	0	0	0	0	0	0	0	0
0.2	10	8.19	1.92	0.45	0.11	0.02	0.01	0.00	0.00
0.4	10	9.38	7.26	2.89	0.95	0.29	0.08	0.02	0.00
0.6	10	9.73	8.85	6.75	3.41	1.40	0.51	0.16	0.02
0.8	10	9.86	9.46	8.44	6.44	3.71	1.76	0.71	0.16
1.0	10	9.92	9.71	9.20	8.10	6.23	3.88	1.99	0.70
1.2	0	7.60	9.28	9.42	8.92	7.82	6.06	3.94	1.98
1.4	0	1.43	6.44	8.58	9.05	8.63	7.56	5.91	3.93

注：表格中数字下有"——"者为已知值，其它为计算值。

（二）混合格式差分方程模型

当一维河流为均匀河段时，其水质模型基本方程为

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial x}=E\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-k_1 c$$

河段内u，E，k_1均为常数，在位置与时间步长Δx、Δt定常下，则一维河流的通用水质差分模型（式2·124）中α_i、β_i、γ_i都是常数，即可去掉其系数的下标i，变成

$$\begin{pmatrix} \beta & \gamma & & & \\ \alpha & \beta & \gamma & & \\ & \alpha & \beta & \gamma & \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \\ & \alpha & \beta & \gamma & \\ & & \alpha' & \beta' & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}^{j+1}=\begin{pmatrix} \delta_1{}' \\ \delta_2 \\ \delta_3 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \qquad (2\cdot223)$$

在步长比$\Delta t/\Delta x=1/u$条件下：

$$\alpha = \gamma = -\frac{E}{\Delta x^2} \qquad (2\cdot224)$$

$$\beta = \frac{1}{\Delta t} - 2\alpha + \frac{k_1}{2} \qquad (2\cdot225)$$

$$\delta_i = c_{i-1}^j\left(\frac{u}{\Delta x} - \frac{k_1}{2}\right) \qquad (2\cdot226)$$

$$\delta_1' = \delta_1 - \alpha c_0^{j+1} \qquad (2\cdot227)$$

$$\alpha' = \alpha - \gamma \qquad (2\cdot228)$$

$$\beta' = \beta + 2\gamma \qquad (2\cdot229)$$

用追赶法求解式2.223的计算公式变为如下：

$$w_1 = \frac{\gamma}{b_1} = \frac{\gamma}{\beta} \qquad (2\cdot230)$$

$$w_i = \frac{\gamma}{b_i} = \frac{\gamma}{\beta - \alpha w_{i-1}}, \quad (i = 1, \cdots, n-1) \qquad (2\cdot231)$$

$$b_i = \beta - \alpha w_{i-1} \qquad (2\cdot232)$$

$$b_n = \beta' - \alpha' w_{n-1} \qquad (2\cdot233)$$

$$y_1 = \frac{\delta_1'}{b_1} = \frac{\delta_1'}{\beta} \qquad (2\cdot234)$$

$$y_i = \frac{\delta_i - \alpha y_{i-1}}{b_i} = \frac{\delta_i - \alpha y_{i-1}}{\beta - \alpha w_{i-1}}, \quad (i = 2, \cdots, n-1) \qquad (2\cdot235)$$

$$y_n = \frac{\delta_n}{\alpha'} \qquad (2\cdot236)$$

$$c_i^{j+1} = y_i - w_i c_{i+1}^{j+1}, \quad (i = 1, \cdots n-1) \qquad (2\cdot237)$$

$$c_n^{j+1} = y_n \qquad (2\cdot238)$$

根据上述追赶过程及其公式，可编制如图2-31所示的一维河流混合式差分方程水质模型模拟计算程序框图。

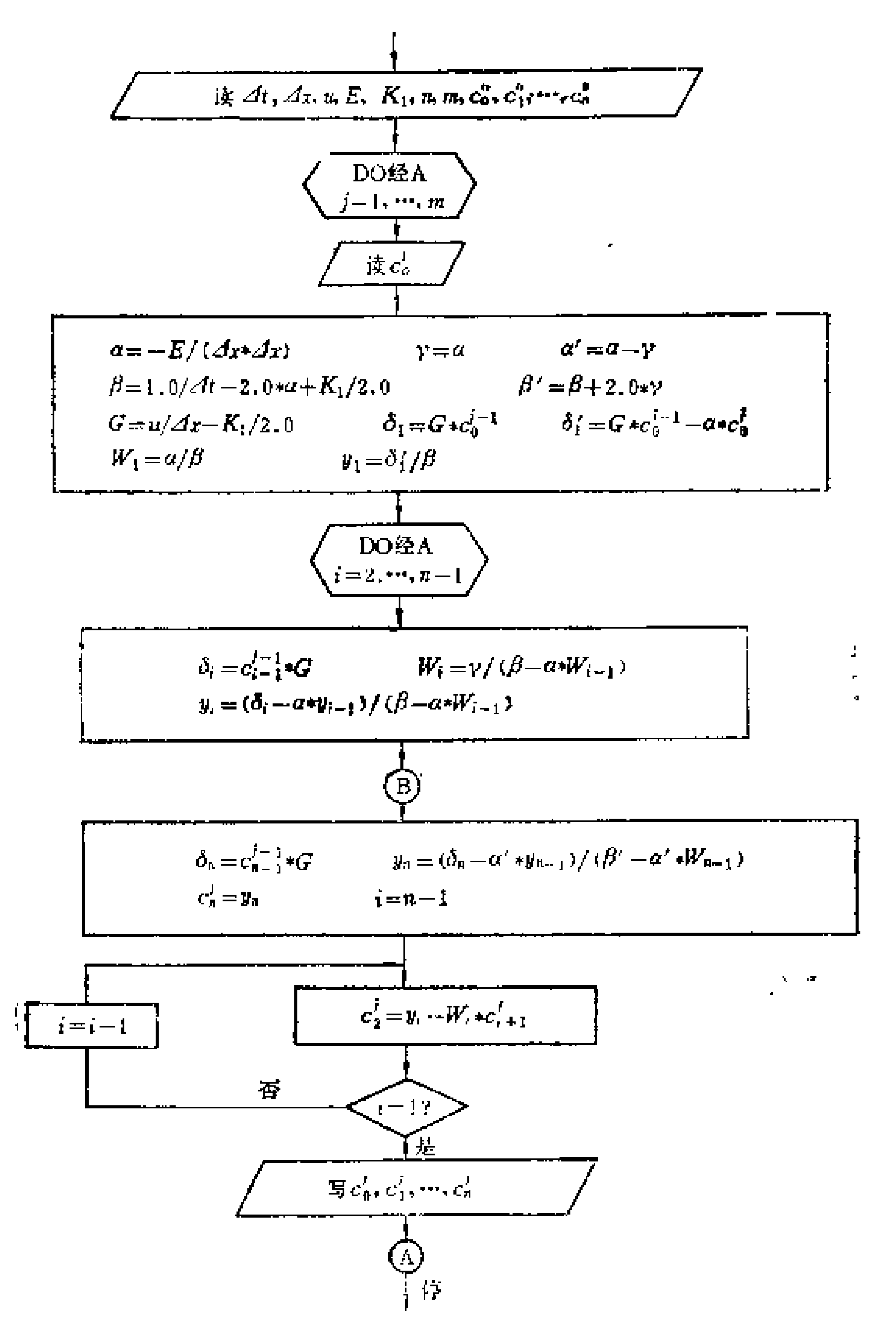


图2-31 一维河流混合式差分方程水质模型模拟计算框图

【例2-20】

某河段长度为1220m，$u=0.405\mathrm{m/s}$，$E=61.9\mathrm{m^2/s}$。差分

为4个小段，每段长305m。结点浓度为c_i^j（$j=1$，$2\cdots$，m；$i=1$，2，$\cdots$，n）。起始条件为$c_1^1=c_1^2=c_1^3$，　$c_1^4=c_1^5=0$。端点浓度对任何时间有$c_n^1=1$，　$c_n^5=0$

求：　c_2^j和c_3^j

解：

按$u\dfrac{\Delta t}{\Delta x}\leqslant 1$的条件，$\Delta t$取为600S。用式（2.223）的混合差分格式解。按图2-31所示的计算框图编制计算程序。由所给条件进行运算，其结果为

$c_2^1=0.7$　　　$c_3^1=0.624$

$c_2^2=0.654$　　　$c_3^2=0.460$

$c_2^3=0.443$　　　$c_3^3=0.340$

第五节　河口水质模型

所谓河口，是指入海河流受到潮汐作用的一段水体，即感潮河段。它与一般河流最显著的区别是受到潮汐的影响，流量变化剧烈，并随潮汐的涌入带来大量的Cl^-离子。潮汐对河口水质的影响具有两重性。一方面在涨潮时海水带来大量的溶解氧，与上游来的淡水相汇，由于湍流加强了水体的混合作用，使水体中的污染物分散得更加均匀，起到了稀释和混合作用，从这个意义上，潮汐可看作是一种具有净化作用的资源。另一方面，由于潮流对河水的顶托，延长了污染物在河口中的停留时间，加剧了耗氧有机物的衰减反应，从而降低水体中的溶解氧。同时，随着潮水入侵所带来的盐分，可看作是一种污染源。如何定量地描述这种潮汐作用对水质的影响，就是建立河口水质模型的目的。

一　河口水质模型的基本方程

河口的数学模型包括水流运动学和污染物质的迁移转化方程

式。

（一）水流运动学基本方程

1．速度方程式

在时间dt内水体某一质点从A（x、y、z）流到c（$x+dx$，$y+dy$，$z+dz$）其流动速度V（u，v，w）是

$$u=\frac{dx}{dt},\quad v=\frac{dy}{dt},\quad w=\frac{dz}{dt} \tag{2·239}$$

因此有

$$u:v:w=dx:dy:dz$$

u，v，w应是时间和空间的函数：

$$u=f_1\ (x,\ y,\ z,\ t)$$
$$v=f_2\ (x,\ y,\ z,\ t)$$
$$w=f_3\ (x,\ y,\ z,\ t)$$

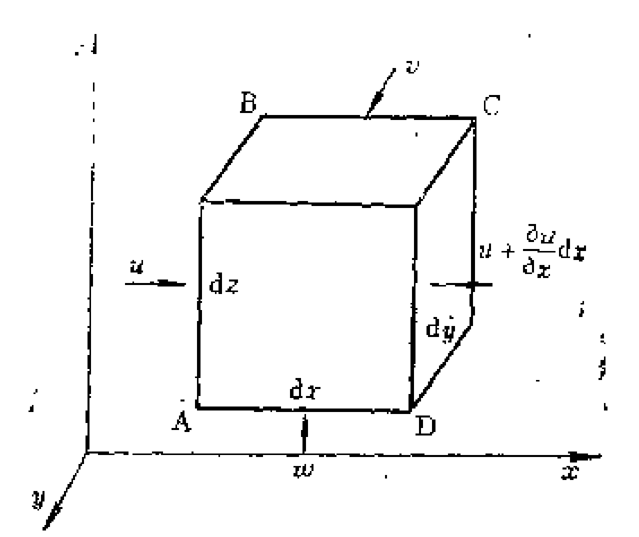


图2-32　微小水质点的空间示意图

其矢量式为$V=iu+jv+kw$

$$V=v\ (x,\ y,\ z,\ t)$$

所以 $$\frac{du}{dt}=\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\frac{dx}{dt}+\frac{\partial u}{\partial y}\frac{dy}{dt}+\frac{\partial u}{\partial z}\frac{dz}{dt}$$

即 $$\frac{du}{dt}=\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}+w\frac{\partial u}{\partial z}$$

同理有

$$\left.\begin{aligned}\frac{dv}{dt}&=\frac{\partial v}{\partial t}+u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}+w\frac{\partial v}{\partial z}\\ \frac{dw}{dt}&=\frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial x}+v\frac{\partial w}{\partial y}+w\frac{\partial w}{\partial z}\end{aligned}\right\} \tag{2·240}$$

其矢量式为 $$\frac{dV}{dt}=\frac{\partial V}{\partial t}+(V\cdot\nabla)V$$

其中∇为运算符号：$\nabla=i\frac{\partial}{\partial x}+j\frac{\partial}{\partial y}+k\frac{\partial}{\partial z}$

以上为理想流体的运动方程。这里需要说明的，u,v,w是水体流经空间任何一点（x，y，z）在t时的速度，而不是代表 某

一质点的流速。

2．连续性方程

我们考虑实际水体为不可压缩流体，并令ρ为水体的密度，且近似认为是均匀的，不随时间变化。(图2-32)

在时间dt内通过AB面的水的质量$=\rho u dz dy dt$通过CD面的流体质量

$$=\rho\left(u+\frac{\partial u}{\partial x}dx\right)dzdydt$$

$$=\rho u dz dy dt+\rho\frac{\partial u}{\partial x}dxdydzdt$$

因而在此体积之内由这一对面积上通过的水体的增量为$+\rho\frac{\partial u}{\partial x}dxdydzdt$同样，考虑通过另外两组面积在内的总质量增量为

$$+\rho\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}\right)dxdydzdt$$

由于水体是连续的，即其增量应为0

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}+\frac{\partial w}{\partial z}=0 \qquad (2\text{·}241)$$

上式即为连续性方程式，其矢量式为

$$\mathrm{div}V=0 \text{ 或者 } \nabla\cdot V=0$$

其物理意义是，无源场的散度为零。

（二）水体中物质的迁移转化方程式

设经过时间Δt，某物质在微元（$\Delta x\Delta y\Delta z$）内浓度变化为Δc，则其质量增加为：

$$\Delta m=\Delta c\cdot\Delta x\cdot\Delta y\cdot\Delta z$$

1）由于平流引起的质量变化：

在x方向上 $(uc)_x\Delta z\Delta y\Delta t-(uc)_{x+\Delta x}\Delta z\Delta y\Delta t$

在y方向上 $(vc)_y\Delta x\Delta z\Delta t-(vc)_{y+\Delta y}\Delta x\Delta z\Delta t$

在z方向上 $(wc)_z\Delta x\Delta y\Delta t-(wc)_{z+\Delta z}\Delta x\Delta y\Delta t$

2）由于扩散引起的质量变化：

根据费克定律有：

在 x 方向上：$\left(-D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)_x\Delta y\Delta z\Delta t-\left(-D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x+\Delta x}\Delta y\Delta z\Delta t$

在 y 方向上：$\left(-D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)_y\Delta x\Delta z\Delta t-\left(-D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{y+\Delta y}\Delta x\Delta z\Delta t$

在 z 方向上：$\left(-D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)_z\Delta x\Delta y\Delta t-\left(-D_z\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{z+\Delta z}\Delta x\ \Delta y\Delta t$

3）基于其它机理的转化

例如有机物以一级反应降解时，其变化量为：$-k_1\cdot c\cdot\Delta x\cdot\Delta y\cdot\Delta z\cdot\Delta t$

其中k_1为反应常数或衰减系数。

根据质量平衡原理，上述三种情况在微元内所产生的物质变化量之和应等于Δm，方程两边同除$\Delta x\cdot\Delta y\cdot\Delta z\cdot\Delta t$得

$$\frac{\Delta c}{\Delta t}=\frac{(uc)_x-(uc)_{x+\Delta x}}{\Delta x}+\frac{(vc)_y-(vc)_{y+\Delta y}}{\Delta y}+\frac{(wc)_z-(wc)_{z+\Delta z}}{\Delta z}$$

$$+\frac{\left(-D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)_x-\left(-D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x+\Delta x}}{\Delta x}+\frac{\left(-D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)_y-\left(-D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)_{y+\Delta y}}{\Delta y}$$

$$+\frac{\left(-D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)_z-\left(-D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)_{z+\Delta z}}{\Delta z}-k_1\cdot c$$

取极限得

$$\frac{\partial c}{\partial t}=-\frac{\partial(uc)}{\partial x}-\frac{\partial(vc)}{\partial y}-\frac{\partial(wc)}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial c}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)-k_1c$$

即 $$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial(uc)}{\partial x}+\frac{\partial(vc)}{\partial y}+\frac{\partial(wc)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)-k_1c \tag{2·242}$$

同样我们可以导出盐度、热平衡和扰动能量密度方程

$$\frac{\partial s}{\partial t}+\frac{\partial(us)}{\partial x}+\frac{\partial(vs)}{\partial y}+\frac{\partial(ws)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial s}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial s}{\partial y}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial s}{\partial z}\right) \tag{2·243}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\partial(uT)}{\partial x}+\frac{\partial(vT)}{\partial y}+\frac{\partial(wT)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial T}{\partial y}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial T}{\partial z}\right)\pm S_T \tag{2·244}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t}+\frac{\partial(ue)}{\partial x}+\frac{\partial(ve)}{\partial y}+\frac{\partial(we)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial e}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial e}{\partial y}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial e}{\partial z}\right)\pm Se \tag{2·245}$$

其中S、T、e、分别表示水体中的盐度、温度和扰动能量密度；S_T、Se为相应的源强。方程（2•243）—（2•245）加上一定的定解条件即为河口的数学模型。

二　河口水质模型的简化和分类

（一）河口模型的简化

上述的河口模型，解析求解现尚无可能，数值求解也难于办到，因此必须加以简化。在实际问题中一些次要因素可以忽略，而使其简化成为可能。

如果我们认为在z方向上浓度分布是均匀的，并取水平方向两个分速度为在垂直方向上作积分的平均值代入方程（2•243）—（2.245)并利用一些近似式，可使三维方程组降维成二维方程组

令

$$U=\frac{1}{h+\zeta}\int_{-h}^{\zeta}udz \tag{2·246}$$

$$V=\frac{1}{h+\zeta}\int_{-h}^{\zeta}vdz \tag{2·247}$$

$$\int_{-h}^{\zeta}\left(u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}\right)dz \doteq (h+\zeta)\left(U\frac{\partial U}{\partial x}+V\frac{\partial U}{\partial y}\right)$$

$$\int_{-h}^{\zeta}\left(u\frac{\partial v}{\partial x}+v\frac{\partial v}{\partial y}\right)dz \doteq (h+\zeta)\left(U\frac{\partial V}{\partial x}+V\frac{\partial V}{\partial y}\right)$$

$$H = h+\zeta \tag{2·248}$$

式中：h为相对参考平面的水深。ξ为相对参考平面上的水面高度，C为谢才系数。则（2.242）方程为

$$\frac{\partial(HC)}{\partial t}+\frac{\partial(HUC)}{\partial x}+\frac{\partial(HVC)}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(HD_x\frac{\partial C}{\partial x}\right)$$

$$+\frac{\partial}{\partial y}\left(HD_y\frac{\partial C}{\partial y}\right)-k_1c+HSc \tag{2·249}$$

同理，我们在水平y方向上作积分可使原方程组降维：

$$\frac{\partial(bc)}{\partial t}+\frac{\partial(bUC)}{\partial x}+\frac{\partial(bVC)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(bD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(bD_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)$$

$$-k_1bc+bs_c \tag{2·250}$$

这里b为河口断面的平均宽度

对于窄、长、浅的河口或根据研究的目的不同，我们甚至可简化为一维方程：

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t}+\frac{\partial(UAC)}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(AD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)-k_1AC+ASc \tag{2·251}$$

其中A为河口的断面面积。

这就和一般河流模型相类似，它们的区别在于定解条件，例如边界条件。

河口模型还可以根据我们使用的目的不同而加以简化。当考虑到在一定的水文和污染源的排放条件下，水质达到平衡时，即方程处于稳态时，对于一维的迁移转化方程有

$$\frac{dUAC}{dx}=\frac{d}{dx}\left(AD_x\frac{dc}{dx}\right)-Ak_1c+AS_C- \tag{2·252}$$

如果只关心水质经过一个潮汐周期的变化从而容易求得某些参数（例如D_x）此时我们可认为潮周平均流量即为不受潮汐影响

的上游河段的淡水流量，即$Au=Q_f$，方程则为：

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t}+Q_f\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(AD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)-Ak_1c+AS_c \quad (2\cdot253)$$

而对于某一均匀河口，即A可看为常数时，则有

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u_f\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)-k_1c+S_c \quad (2\cdot254)$$

当把弥散系数D_x视为常数时，有

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u_f\frac{\partial c}{\partial x}=D_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-k_1c+S_c \quad (2\cdot255)$$

式中：Q_f和u_f分别为淡水流量和流速。

方程（2.255）与一般河流方程基本相同，只是Dx的量级较大，u_f较小，其解析解法也成为可能了。这在河流水质模型中已经给出，不再赘述。

（二）河口数学模型的分类

河口数学模型，特别是水力学数学模型的研究已经持续了几十年，通过各种简化和近似，开发了众多的模型，其解法，包括数值解法都有很大进展。对于我们研究污染物在河口中迁移和转化来说，其水力学模型可作为已知的，其流速场分布可认为是予给的，或者可以作为一个子程序块包含在总体模型中。我们这里所说的，仅是物质迁移转化方程的分类。

国外在研究河口模型分类时，一般是根据空间维数、参考系的选取，研究的时间尺度几个方面来划分的。

就空间维数而言可以有（1）纵向一维，（2）平面二维，（3）竖向二维（4）三维。特殊情况下还有零维出现。

就参照系而言（1）欧拉参考系，其座标相对河岸是静止的。（2）非欧参考系。例如拉格朗日参考系是随体的，即座标系是随研究的质点运动的。

就时间尺度而言可以是（1）动态的，（2）稳态的或者是跨潮周取平均的。即水文水质因素均不是某一瞬时量而是整个潮

周内的平均值

$$u_f=\frac{1}{\tau}\int_t^{t+\tau}u(t)\mathrm{d}t \tag{2·256}$$

$$Q_f=\frac{1}{\tau}\int_t^{t+\tau}Au(t)\mathrm{d}t \tag{2·257}$$

$$C=\frac{1}{\tau}\int_t^{t+\tau}c(t)\mathrm{d}t \tag{2·258}$$

其中τ为潮汐周期也可以是相邻的两个潮汐周期之和。

下面列表给出欧拉座标系中河口迁移转化方程的典型分类供参考（表2-12）。

三　一维河口潮周平均的有限元水质模型

（一）一维河口潮周平均的动态有限元水质模型

1963年托马安(Thomann)提出了著名的美国特拉华(Delaware)一维河口有限元水质模型，简称为“托马安方程”。

托马安采用的有限单元法其原理是：（见图2-33）

假定1：用有限长度（Δ_{xi}）的体积（V_i）单元i来代替连续的河口纵向空间；

假定2：每一个单元为完全混合体；相当于CFSTR；

假定3：两相邻单元交界面上的浓度为两单元浓度的加权平均值。权系数按两单元浓度为直线变化取值。

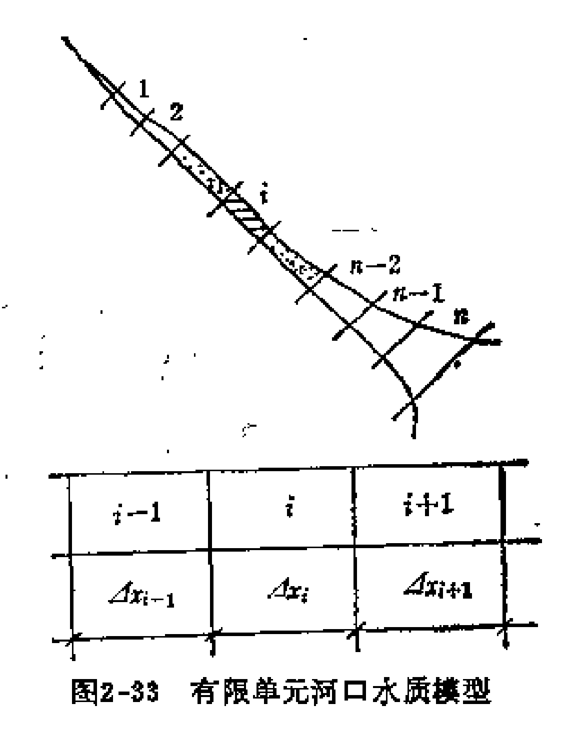


图2-33　有限单元河口水质模型

设两相邻单元的编号为i和j，令

表2-12 河口迁移转化模型分类表

代号	名称	数学表达式	功用
1A	一维潮汐平均模型	$\frac{\partial(AC)}{\partial t}+u_f A\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(AD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+Sc$	跨潮汐周期研究水质变化
1T	一维潮变模型	$\frac{\partial(AC)}{\partial t}+\frac{\partial(UAC)}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(AD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+Sc$	描述潮汐周期内水质变化
1TB	分支(branching) 一维潮变模型		节点相联的网络模型
2VA	两维竖向潮汐平均模型	$\frac{\partial(\overline{bc})}{\partial t}+\frac{\partial(\overline{Ubc})}{\partial x}+\frac{\partial(\overline{Wbc})}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(bD_x\frac{\partial\bar{c}}{\partial x}\right)$ $+\frac{\partial}{\partial z}\left(bD_z\frac{\partial\bar{c}}{\partial z}\right)+Sc$	用于竖向分层横向均匀河口跨潮汐周期的水质变化
2VT	两维竖向潮变模型	$\frac{\partial(bC)}{\partial t}+\frac{\partial(UbC)}{\partial x}+\frac{\partial(WbC)}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(bD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)$ $+\frac{\partial}{\partial z}\left(bD_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)+Sc$	用于竖向分层横向均匀潮汐周期内的水质模拟
2HA	两维平面潮汐平均模型	$\frac{\partial(\overline{HC})}{\partial t}+\frac{\partial(\overline{UHC})}{\partial x}+\frac{\partial(\overline{HVC})}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(HD_x\frac{\partial\bar{c}}{\partial x}\right)$ $+\frac{\partial}{\partial y}\left(HD_y\frac{\partial\bar{c}}{\partial y}\right)+Sc$	用于竖向均匀跨潮汐周期水质模拟

续表

代　号	名　　称	数　学　表　达　式	功　　用
$2HT_1^1$	两维平面潮变模型	$\frac{\partial(HC)}{\partial t}+\frac{\partial(UHC)}{\partial x}+\frac{\partial(HVC)}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(HD_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)$ $+\frac{\partial}{\partial y}\left(HD_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)+Sc$	描述竖向均匀潮汐周期水质变化
$3A$	三维潮汐平均模型	$\frac{\partial\bar{c}}{\partial t}+\frac{\partial(\overline{uc})}{\partial x}+\frac{\partial(\overline{vc})}{\partial y}+\frac{\partial(\overline{wc})}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial\bar{c}}{\partial x}\right)$ $+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial\bar{c}}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial\bar{c}}{\partial z}\right)+Sc$	描述跨潮汐周期水质变化
$3T$	三维潮变模型	$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial(uc)}{\partial x}+\frac{\partial(vc)}{\partial y}+\frac{\partial(wc)}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)$ $+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial c}{\partial z}\right)+Sc$	描述潮汐周期内水质变化

表2-12　清晰地说明了各类模型的特点。可根据实际问题作出较好的选择。

$$\Delta x_{ij} = \frac{\Delta x_i + \Delta x_j}{2} \tag{2·259}$$

$$c_{ij} = \alpha_{ij}\, c_i + \beta_{ij}\, c_j \tag{2·260}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\Delta x_j}{2\Delta x_{ij}} \tag{2·261}$$

$$\beta_{ij} = 1 - \alpha_{ij} \tag{2·262}$$

式中：　Δx_i，Δx_j——第 i 和第 j 单元的长度；

　　c_i，c_j——第 i 和第 j 单元的浓度；

　　α_{ij}，β_{ij}——i、j 单元交界面上的权系数；

　　c_{ij}——i、j 单元交界面处的浓度。

根据第i单元的质量平衡关系（见图2-34），在一个平均潮汐周期的时间间隔（从涨潮到落潮的周期）内，某物质在时间坐标t方面的总变化率为$\frac{V_i Dc_i}{dt}$，它是由以下四种因素所引起：

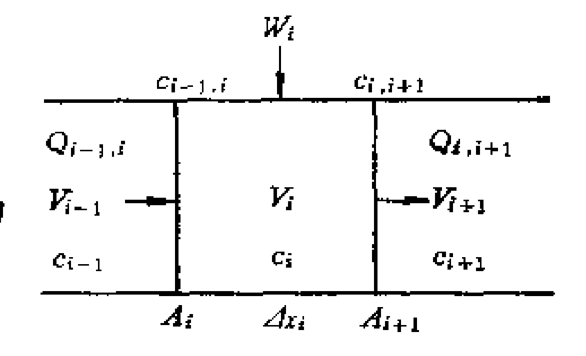


图2-34　单元的质量平衡示意图

（1）河口平流所携带的物质量

$Q_{i-1,i}\, c_{i-1,i} - Q_{i,i+1}\, c_{i,i+1}$

（2）由单元间界面上容积弥散引起的物质量

$[-E'_{i-1,i}(c_i - c_{i-1})] - [-E'_{i,i+1}(c_{i+1} - c_i)]$

（3）由污染物的源或漏引起的W_i

（4）由生物降解引起的

①对BODc的降解（$c_i = B_i$）

$-k_{ci} B_i V_i$

②对BOD_N的降解（$c_i = N_i$）

$-k_{Ni}\, N_i V_i$

③对溶解氧亏（$c_i = D_i$）

$$(k_{ci}B_i + k_{Ni}N_i - k_{fi}D_i)V_i$$

综合以上各因素，可得差微分方程

$$V_i\frac{dc_i}{dt} = Q_{i-1,i}c_{i-1,i} - Q_{i,i+1}c_{i,i+1} + E'_{i,i+1}(c_{i+1} - c_i)$$

$$- E'_{i-1,i}(c_i - c_{i-1}) - k_ic_iV_i + W_i \qquad (2\cdot263)$$

假定第i单元是所研究河段上的某单元，而该河段上各 单 元的参数相等。即

$$k_{ci} = k_c,\ k_{Ni} = k_N,\ k_{fi} = k_f\ \ E'_{i,i+1} = E'_i$$

将方程（2·259）—（2·262）代入差微分方 程（2·263）可 得关于BOD$_C$、BOD$_N$、DO亏的如下三个方程

$$V_i\frac{dB_i}{dt} = (Q_{i-1,i}\alpha_{i-1,i} + E'_i)B_{i-1} - (Q_{i,i+1}\alpha_{i,i+1} -$$

$$Q_{i-1,i}\beta_{i-1,i} + E'_i + E'_{i+1} + k_cV_i)B_i -$$

$$(Q_{i,i+1}\beta_{i,i+1} - E'_{i+1})B_{i+1} + W_{bi} \qquad (2\cdot264)$$

$$V_i\frac{dN_i}{dt} = (Q_{i-1,i}\alpha_{i-1,i} + E'_i)N_{i-1} - (Q_{i,i+1}\alpha_{i,i+1} -$$

$$Q_{i-1,i}\beta_{i-1,i} + E'_i + E'_{i+1} + K_NV_i)N_i -$$

$$(Q_{i,i+1}\beta_{i,i+1} - E'_{i+1})N_{i+1} + W_{Ni} \qquad (2\cdot265)$$

$$V_i\frac{dD_i}{dt} = (Q_{i-1,i}\alpha_{i-1,i} + E'_i)D_{i-1} - (Q_{i,i+1}\alpha_{i,i+1} -$$

$$Q_{i-1,i}\beta_{i-1,i} + E'_i + E'_{i+1} + k_fV_i)D_i -$$

$$(Q_{i,i+1}\beta_{i,i+1} - E'_{i+1})D_{i+1} + W_{Di}$$

$$+ (k_cB_i + k_NN_i)V_i \qquad (2\cdot266)$$

设BOD$_C$、BOD$_N$ 和溶解氧亏的各单元浓度向量为B、N、D，各单元的源漏项向量为W'_B、W'_N、W'_D，各单元的总变化率向量为

$V\frac{dB}{dt}$、$V\frac{dN}{dt}$、$V\frac{dD}{dt}$。则可写成关 于BOD$_C$、BOD$_N$ 和 氧 亏

的矩阵差微分方程为

$$V\frac{dB}{dt}=-G'B+W'_B+g \tag{2·267}$$

$$V\frac{dN}{dt}=-J'N+W_N+i \tag{2·268}$$

$$V\frac{dD}{dt}=-H'D+V(k_eB+k_NN)+W'_D+h \tag{2·269}$$

式中： $g=(g_1,0,0,\cdots,0,g_n)^T$；

$i=(j_1,0,0,\cdots,0,j_n)^T$；

$k=(h_1,0,0\cdots,0,h_n)^T$；

$$G'=\begin{pmatrix} b_1 & e_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & e_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & e_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{pmatrix};$$

$$J'=\begin{pmatrix} J_1 & e_1 & & & 0 \\ a_2 & J_2 & e_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & J_{n-1} & e_{n-1} \\ 0 & & & a_n & J_n \end{pmatrix};$$

$$H'=\begin{pmatrix} H_1 & e_1 & & & 0 \\ a_2 & H_2 & e_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & H_{n-1} & e_{n-1} \\ 0 & & & a_n & H_n \end{pmatrix};$$

$$V=\begin{pmatrix} V_1 & & & 0 \\ & V_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & V_n \end{pmatrix},$$

$a_i=-Q_{i-1,i}\ \alpha_{i-1,i}-E'_i;$

$e_i=Q_{i,i+1}\ \beta_{i,i+1}-E'_{i+1};$

$b_i=Q_{i,i+1}\ \alpha_{i,i+1}-Q_{i+1,i}\ \beta_{i+1,i}+E'_i+E'_{i+1}+k_cV_i;$

$J_i=b_i+(k_N-k_c)V_i;$

$H_i=J_i+(k_f-k_N)V_i;$

$g_1=-a_1\ B_0;$

$g_n=-e_n\ B_{n+1};$

$j_1=-a_1N_0;$

$j_n=-e_n\ N_{n+1};$

$h_1=-a_1\ D_0;$

$h_n=-e_n\ D_{n+1};$

$\alpha_{ij}=\dfrac{\Delta x_j}{\Delta x_i+\Delta x_j};$

$\beta_{ij}=1-\alpha_{ij};$

$E'_i=\dfrac{2EA_i}{\Delta x_i+\Delta x_j}$。

各断面处的符号

Q_i——流量；　A_i——横断面积；　B_i——BOD_C浓度；

N_i——BOD_N浓度；　D_i——氧亏浓度。（$1\leqslant i\leqslant n$）

各单元的符号

Δ_{xi}——单元的长度；　V_i——单元的容积；

W_{Bi}——单元的BOD_C源；　W_{Ni}——单元的BODN源；

W_{Di}——单元的氧亏源；

k_c、k_N、k_f——BOD_C耗氧系数、BOD_N耗氧系数及复氧系数；

E——弥散系数；　　E'_i——单元的容积弥散系数；

（$1 \leqslant i \leqslant n-1$）。

（二）一维河口潮周平均的稳态有限元水质模型

1．一维河口稳态有限元水质模型

稳态条件下，$dc_i/dt=0$。差微分方程（2·267—2·269）可简化为下列线性方程组：

$$\mathbf{G}\ \mathbf{B}=\mathbf{W}_B \tag{2·270}$$

$$\mathbf{J}\ \mathbf{N}=\mathbf{W}_N \tag{2·271}$$

$$\mathbf{H}\ \mathbf{D}=\mathbf{W}_D \tag{2·272}$$

式中：G、J、H——由边界条件修正方程(2·267)、(2·268)、(2·269)中的矩阵G′、J′、H′最后一行的两个元素形成。即

$$a_n \Longleftarrow a_n - 2\alpha_{n-1,n}\, e_n$$

$$b_n \Longleftarrow b_n + (3-2\beta_{n-1,n})\, e_n$$

$$j_n \Longleftarrow j_n + (3-2\beta_{n-1,n})\, e_n$$

$$H_n \Longleftarrow H_n + (3-2\beta_{n-1,n})\, e_n;$$

$\mathbf{W}_B$、$\mathbf{W}_N$、$\mathbf{W}_D$——由边界条件修正方程（2·267）、(2·268)、和（2.269）的向量$\mathbf{W}'_B$、$\mathbf{W}'_N$、$\mathbf{W}'_D$而形成。即

$$W_{B1} \Longleftarrow W_{B1} + g_1$$

$$W_{N1} \Longleftarrow W_{N1} + j_1$$

$$W_{D1} \Longleftarrow W_{D1} + (k_c B_1 + k_N N_1) V_1 + h_1$$

$$W_{Di} \Longleftarrow W_{Di} + (k_c B_i + k_N N_i) V_i \quad (i \geqslant 2)。$$

边界条件

1）　长度假定

假定第零单元与第1单元等长，第$n+1$单元与第n单元等长。则

$$\Delta x_0 = \Delta x_1, \qquad \Delta x_{n+1} = \Delta x_n$$

$$\alpha_{0,1} = \beta_{0,1} = \alpha_{n,n+1} = \beta_{n,n+1} = \frac{1}{2}$$

2）　第零单元浓度假定

设第零单元的浓度等于第1个断面的浓度(已知)。即$c_0 = c_{0,1}$

3）第$n+1$个单元的浓度，由第$n-1$个单元浓度c_{n-1}与第n个单元浓度c_n，直线外插

得：
$$c_{n+1} = -\alpha_{n-1,n}c_{n-1} + (3 - 2\beta_{n-1,n})c_n$$

2. 一维稳态河口差微分方程组的解法

方程组（2·270）、(2·271）和（2·272）的系数矩阵皆为三对角矩阵。用追赶法求解。但此处方程组还应满足约束条件：

$$0 \leqslant D_i \leqslant |O_s| \qquad (2\cdot273)$$

式中：　O_s——水中饱和溶解氧浓度。

凡不满足约束条件的解D_i，往往在上游，而追赶法是通过"追"由下游的浓度逐一算到上游的浓度，这样往往难以体现受约束的解对其他不受约束的解的影响。因此应该用消去法，将H转变为下三角阵，以便可以由上游单元的浓度逐一算出其他单元的浓度。

通过消去，使(2·270)变为下面形式

$$\begin{pmatrix} S_1 & & & 0 \\ a_2 & S_2 & & \\ & a_3 & S_3 & \\ & & \ddots & \ddots \\ 0 & & a_n & S_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W'_{D1} \\ W'_{D2} \\ W'_{D3} \\ \vdots \\ W'_{DN} \end{pmatrix} \qquad (2\cdot274)$$

其中$S_n \Leftarrow H_n$

$S_i \Leftarrow H_i - a_{i+1}e_i/S_{i+1}$

$W'_{Di} \Leftarrow W_{Di} - W'_{D,i+1}e_i/S_{i+1}$

$(1 \leqslant i \leqslant n-1)$

回代时考虑约束

$D_1 \Leftarrow W'_{D1}/S_1$

若$D_{i-1} < 0$　则令$D_{i-1} = 0$

若$D_i > O_s$　则令$D_{i-1} = |O_s|$

$D_i \Leftarrow (W'_{Di} - a_iD_{i-1})/S_i$

其中（$2\leqslant i\leqslant n$）。

方程（2·270）（2·271），一般不考虑约束条件。

由此，我们就求得了单元浓度向量B、N、D的如下断面浓度向量

第1断面（上游）的浓度为已知c_{01}。

第$n+1$断面的浓度可由直线插值得

$$c_{n,n+1}=2\cdot c_n-c_{n-1,n} \tag{2·275}$$

其他断面可由$c_{ij}=\alpha_{ij}c_i+\beta_{ij}c_j$式求得。

这样，就获得了BOD_C、BOD_N氧亏的如下断面浓度向量，它们皆为$n+1$维

$$B_S=(B_{0,1},\ B_{1,2},\ \cdots,\ B_{n,n+1})^T$$

$$N_S=(N_{0,1},\ N_{1,2},\ \cdots,\ N_{n,n+1})^T$$

$$D_S=(D_{0,1},\ D_{1,2},\ \cdots,\ D_{n,n+1})^T$$

若B_S、N_S、D_S为已知，则可由式（2·270）求得B、N、D，从而可算出W_B、W_N、W_D，即可预报将来河段允许排入的污染物的量。

第六节　河流水温与综合水质模型

一　河流水温模型

（一）水体与大气之间的热交换

水体与大气之间的热交换是河水温度变化的基本原因。水体与大气之间通过三种途径进行热交换：即辐射、对流和蒸发。其相应的传热量分别为φ_r、φ_c、φ_e。

1．辐射传热量φ_r

$$\varphi_r=I-R_L+G-R_s-S \tag{2·276}$$

式中：I——入射到水面的太阳辐射（短波）；

R_L——水面反射的太阳辐射，$R_L\doteq 0.15I$；

G——大气辐射（长波）；

$$G=\sigma\ (0.848-0.249\times10^{-0.069E_L})(T_L+273)^4$$
$$(1+0.17\omega^2)\ ;$$

ω——云度，$(0\leqslant\omega\leqslant1)$；

E_T——空气中的水蒸气分压，(mmHg)[1]；

T_L——空气温度，(°C)；

σ——常数，

$$\sigma=5.7\times^{-8}W/(m^2\cdot k)=1.36\times10^{-8}cal/(s\cdot m^2\cdot k)$$
$$=4.896\times10^{-9}cal/(h\cdot cm^2\cdot k)\ ;$$

R_2——水面反射的大气辐射，$R_2=0.03G$；

S——水体发出的长波辐射，

$$S=0.97\sigma\ (T+273)^4;$$

T——水温，(°C)。

或写成

$$\varphi_r=0.85I+10^{-8}\times(2.782-0.817\times10^{-0.069E_L})\times(T_L+273)^4$$
$$\times(1+0.17\omega^2)\ -4.749\times10^{-8}(T+273)^4 \qquad (2\cdot277)$$

E_L和T_L可以取水面上2m处的值作为近似值。

上述公式适用于水面宽阔的河、湖。对于有河岸遮险的窄河，只能得到近似的结果。

2. 蒸发传热量φ_e

$$\varphi_e=\ (c_1+c_2V_\omega^{c_3})\ \ (E_L-E_T) \qquad (2\cdot278)$$

式中，$V\omega$——水面上2m处风速，(m/s)，

E_T——水温为T时的饱和蒸汽压（mmHg），

$$E_T=0.75\exp\left[54.721-\frac{6788.6}{T+273.16}-5.0016\ln(T+273.16)\right]$$

或；
$$E_T=\exp\left(-\frac{5411}{T+273}+21.32\right);$$

---

[1] 1mmHg=133.322Pa

c_1, c_2, c_3——经验系数，可取$c_1=0$，$c_3=0.5$或1.0，

$c_2=11.64\mathrm{W}/(\mathrm{m^2\cdot mmHg})=2.78\mathrm{cal}/(\mathrm{s\cdot m^2\cdot mmHg})$

$=1.0\mathrm{cal}/(\mathrm{h\cdot cm^2\cdot mmHg})$。

即
$$\varphi_e=\sqrt{V_\omega}\left[E_L-\exp\left(-\frac{5411}{T+273}+21.32\right)\right] \quad (2\cdot279)$$

3．对流传热量φ_c

$$\varphi_c=\varphi_e\frac{1}{c_b}\quad\frac{T-T_L}{E-E_L} \quad (2\cdot280)$$

或
$$\varphi_c=\frac{1}{c_b}(c_1+c_2V_\omega^{c_3})(T-T_L) \quad (2\cdot281)$$

式中：$c_b=2.03\mathrm{K/mmHg}$；

T_L=水面上2m处空气温度，℃。

即
$$\varphi_c=0.493\sqrt{V_\omega}(T-T_L) \quad (2\cdot282)$$

故总传热量

$$\varphi_0(T)=\varphi_r+\varphi_e+\varphi_c \quad (2\cdot283)$$

（二）一维河流温度模型

对一个均匀的河段，如忽略弥散，由气象数据给出I、T_L、E_L、V_ω和ω的每小时资料。热源W和支流q都在河段起始断面处输入（见图2-35）。则河流温度模型的基本方程可表达为

$$\begin{cases}\dfrac{dx}{dt}=u\\[2ex]\dfrac{dT}{dt}=\dfrac{1}{\rho c_p h}\varphi_0(t,T)\end{cases} \quad (2\cdot284)$$

式中：h——平均水深；

ρ——水的密度；

Cp——水的比热。

方程(2·284)在初值条件x_{in}（始端坐标）和t_{in}（始端时间）下积分得

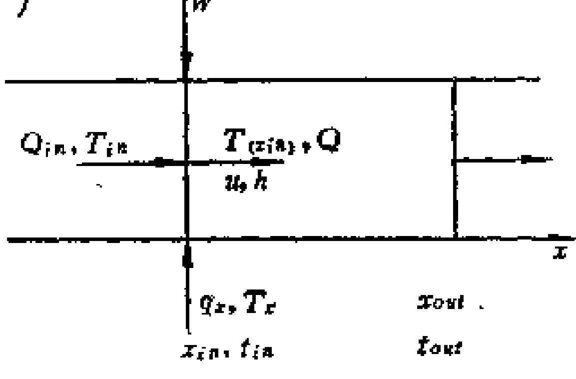


图2-35　一维河流温度模型示意图

$$x - x_{in} = u\ (t - t_{in}) \tag{2·285}$$

方程还可改写为

$$\frac{dT}{dx} = \frac{1}{\rho c_p h u}\varphi_0(t, T) \tag{2·286}$$

始端河水水温与流量

$$T(x_{in}) = T_{in} + \frac{W}{Q\rho c_p} + \frac{q}{Q}(T_e - T_{in}) \tag{2·287}$$

$$Q = Q_{in} + q \tag{2·288}$$

式中：　W——起始断面处进入的热源强度；

T_{in}, Q_{in}——上游输入河水的水温和流量；

T_x, q_x——起始断面处旁侧入流的水温和流量。

方程（2.286）可用数值解法求解。

$$\begin{cases} T(x+\Delta x) = T(x) + \dfrac{\Delta t}{\rho c_p h}\varphi_0\left(t + \dfrac{\Delta t}{2},\ T(x) + \dfrac{T(x+\Delta x) - T(x)}{2}\right) & (2·289) \\ \Delta x = (x_{out} - x_{in})/n & (2·290) \\ \Delta t = \Delta x/u & (2·291) \end{cases}$$

式中：Δx——步长；

x_{in}, x_{out}——计算河段的始端与终端坐标；

n——离散成微小单元的数目；

u——断面平均流速。

上述差分方程可用图2-36的程序进行迭代计算。由此可计算得出水流每向下移动一个单元的温度变化。如入流温度不变，则可获得稳态条件下河流中水温的时—空分布。

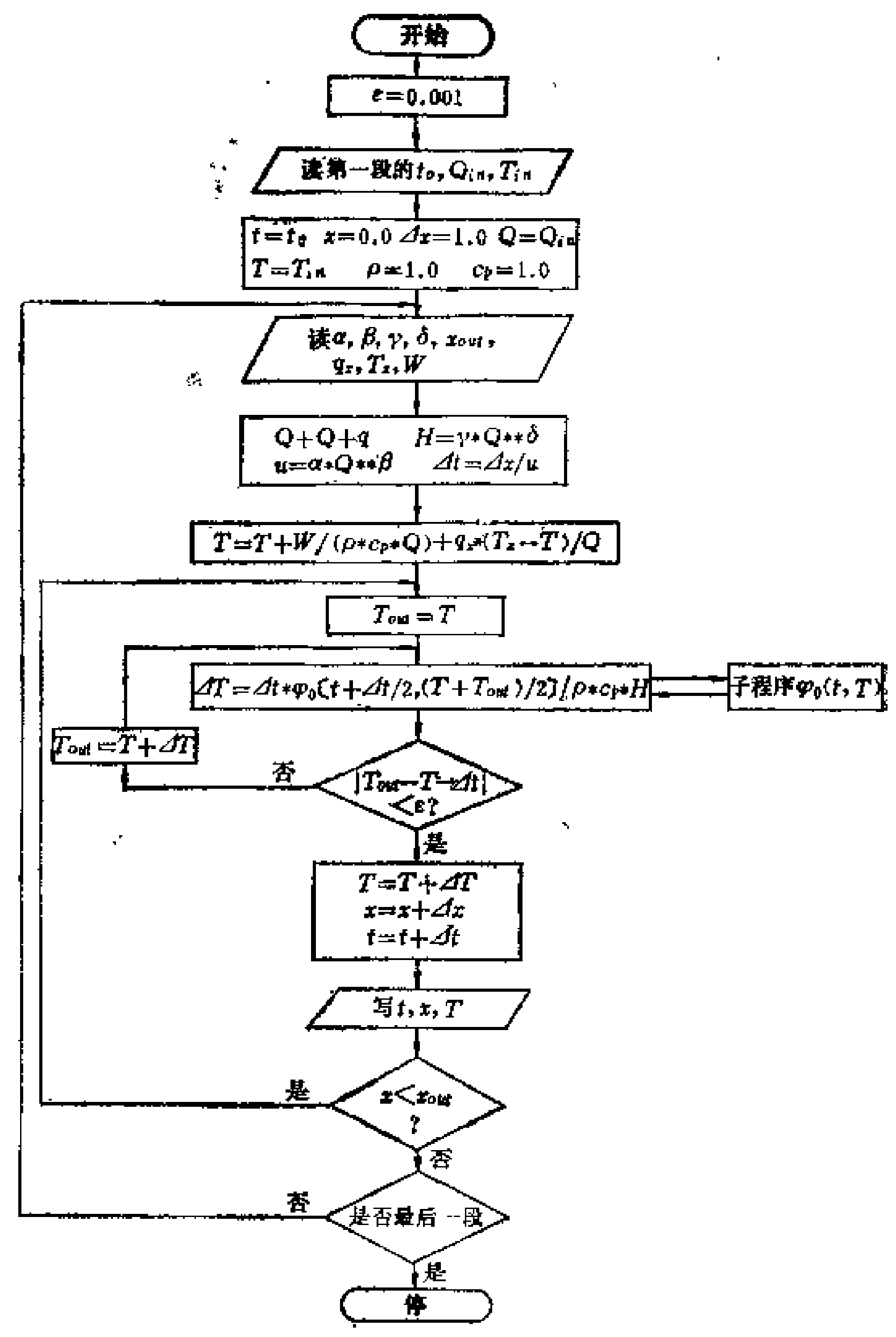


图2-36 河流温度模型计算框图

（三）线性化的一维河流温度模型

如果我们只需要以日平均值来表达河流的水温变化。此时可

用日平均的气象资料按下式估算x断面处的日平均水温

$$T = T_{in} + \Delta T_0 e^{-c_2 x} + \frac{c_1}{c_2}(1 - e^{-c_2 x}) \qquad (2\text{-}292)$$

式中：$\Delta T_0 = \frac{W}{Q} + \frac{q}{Q}(T_x - T_{in})$；

$$c_1 = \frac{\varphi_0(T_{in})}{\rho c_p h u};$$

$$c_2 = -\frac{\frac{\partial \varphi_0}{\partial T}(T_{in})}{\rho c_p h u}。$$

$$\frac{\partial \varphi_0(T_{in})}{\partial T} \doteq \frac{\varphi_0(T_{in} + 0.01) - \varphi_0(T_{in})}{0.01}$$

$$\varphi_0(T) = 0.85I + 10^{-9} \times (2.782 - 0.817 \times 10^{-0.069 \times E_L})$$
$$\times (T_L + 273)^4 \times (1 + 0.17\omega^2) - 4.749 \times 10^{-9} \times (T + 273)^4$$
$$+ \sqrt{V\omega} \times [E_L - \exp(-5411 + (T + 273) + 21.32)$$
$$+ 0.493 \times (T - T_L)]$$

上述计算过程可用图2-37的框图来表达。

以上线性化的一维河流温度模型，若以每次改变某参数（±10%）的方法，作灵敏度的分析，可以发现各参数对其计算结果影响的大小有以下由大到小的排列顺序：

$T_{in} > T_L > E_L > I > T_x > W > Q_{in} > V_\omega > q > \delta > \omega > \beta > \alpha > \gamma$。

这表明上游来水的温度T_{in}和气象参数T_L、E_L对下游水温影响最大，其次则是太阳辐射强度I、支流水温T_x和热源W。这也表明水面上的换热过程主要是蒸发，这与实际状况是符合的。可见，在使用此模型时，应注意保证T_{in}、T_L和E_L这三个数据有足够的可靠性，对其它参数可按上列顺序递降其要求。

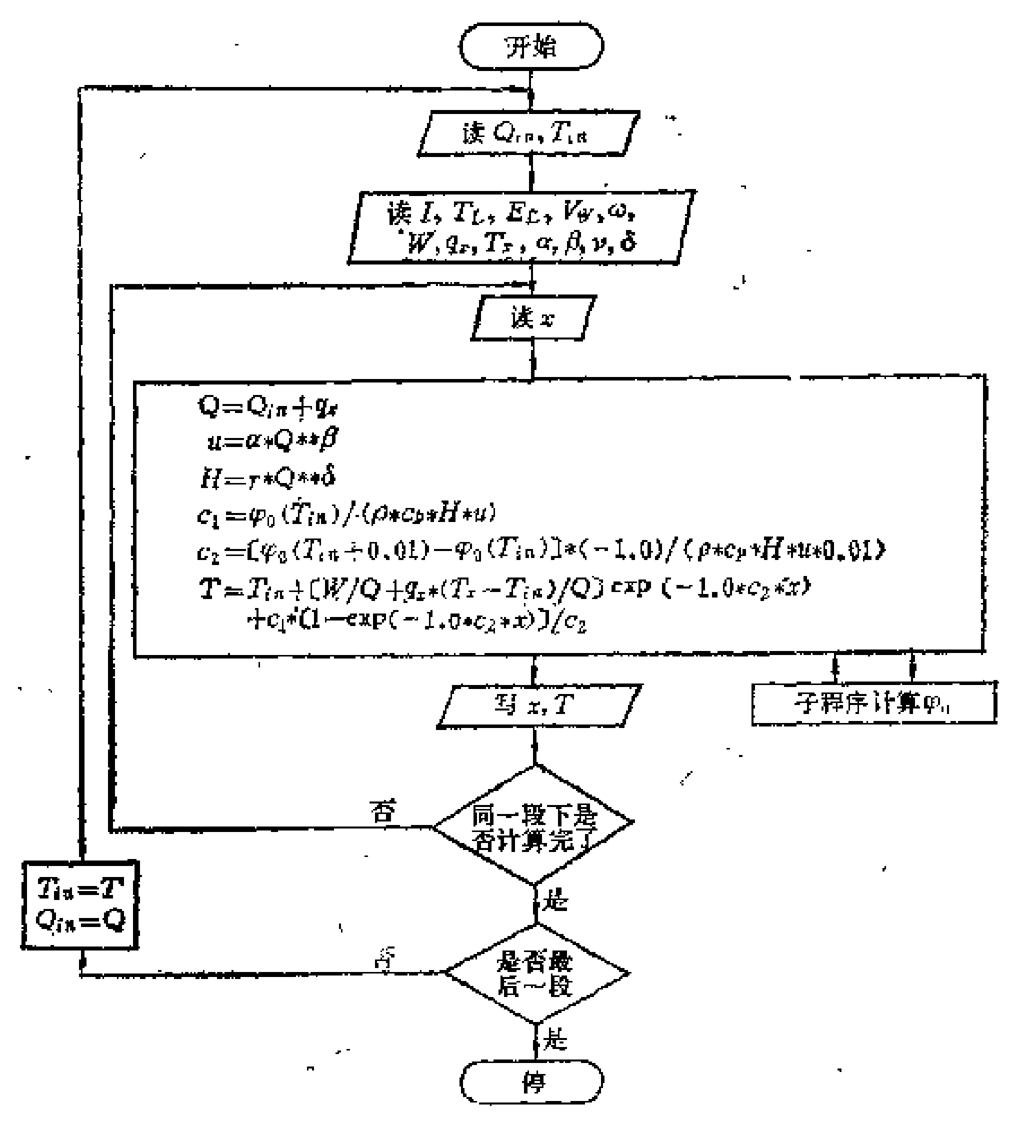


图2-37　线性化温度模型计算框图

二　河流综合水质模型

前述各种模型中污染物组份的状态变量大都是BOD和DO，而奥康纳模型中则有BOD_c、BOD_N和DO三个变量。六十年代中期以后发展了这类包括更多状态变量的水质模型。有人称之为"第二代"BOD-DO模型。由于水体对有机污染物的自净作用在相当程度上是依靠水生生物的生命活动，但是工业废水中还含有一些生物难降解的物质以及重金属等毒物。因此要全面描述水体的水质就必须研究水生生态系统和水质组分之间的联系，就需要对多组

分的综合体系建立水质模型。七十年代起美国等发展了不少河流、水库和湖泊的综合水质模型。较成功的有美国QUAL-Ⅰ、QUAL-Ⅱ河流综合水质模型，LAKECO湖泊生态模型，WQRRS水库系统中水的模型等。本节将介绍QUAL-Ⅱ河流综合水质模型。

QUAL-Ⅱ模型是1973年美国环保局开发的，1976年3月又经过修订。QUAL-Ⅱ模型可以按使用者所希望的任意组合方式模拟以下十三种水质：溶解氧、生化需氧量、温度、藻类——叶绿素a、氨氮、亚硝酸盐氮、硝酸盐氮、溶解的正磷酸盐、大肠杆菌、一种任选的可衰减组分、三种不能衰减的惰性物组分。QUAL-Ⅱ可以研究入流污水负荷（包括数量、质量和位置）对受纳河流水质的影响；也可用它来研究非点源问题。它既可用作为稳态模型，也可用作为时变的动态模型使用。QUAL-Ⅱ适用于枝状河流，它假设河流中的平流和扩散作用只在主流方向上是主要的，是一个一维的河流综合水质模型。它允许沿河有多个排污口、取水口、支流，也允许入流量有缓慢的变化，它可被用于计算靠增加河流流量来满足预定溶解氧水平时所需要的稀释流量。

图2-38表示了QUAL-Ⅱ模型所描写的主要水质组分之间的相互联系。图中箭头所表示的方向是在一个受到一般污染的环境中常规的水质系统运行方向。大肠杆菌和任选的可衰减组分被认为

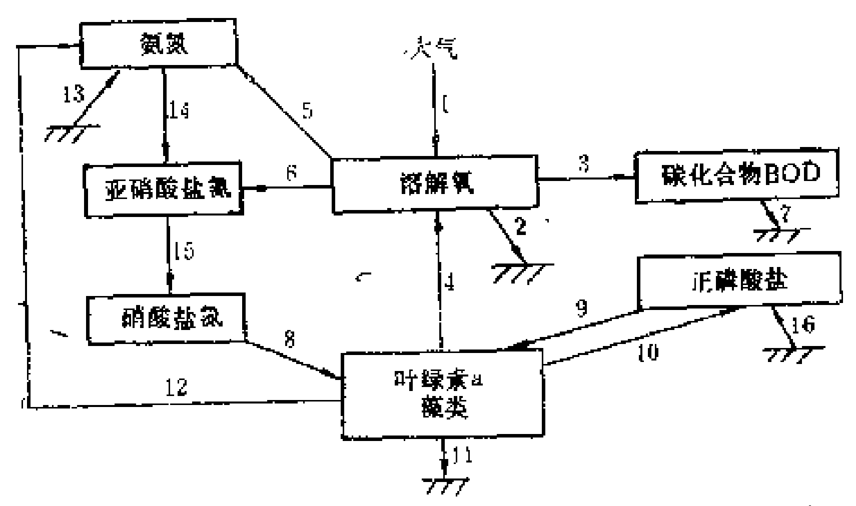


图2-38　QUAL-Ⅱ模型各水质组分的关联

与其它组分无关，三种不衰减组分与图中所示的组分没有任何关系。

图2-38中各个箭头所代表的相互作用关系是：1）复氧作用；2）河底生物（包括底泥）耗氧；3）碳化BOD降解耗氧；4）光合作用产氧；5）氨氮氧化耗氧；6）亚硝酸盐氮氧化耗氧；7）碳化合物BOD的沉淀；8）浮游植物对硝酸盐氮的吸收；9）浮游植物对磷（磷酸盐）的吸收；10）浮游植物呼吸产生磷（磷酸盐）；11）浮游植物的死亡、沉淀；12）浮游植物呼吸产生氨氮；13）底泥释放氨氮；14）氨氮转化为亚硝酸盐氮；15）亚硝酸盐氮转化为硝酸盐氮；16）底泥释放磷。

对于某组分C，QUAL-Ⅱ模型的基本方程是

$$\frac{\partial m}{\partial t}=\frac{\partial\left(A_x D_L \frac{\partial c}{\partial x}\right)}{\partial x}\mathrm{d}x-\frac{\partial(A_x u c)}{\partial x}\mathrm{d}x+(A_x\mathrm{d}x)\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t}+S \tag{2·293}$$

式中：m——所考察物的质量，〔M〕；

x——纵向坐标，〔L〕；

t——时间，〔T〕；

c——所考察物质在河水中的浓度，〔ML^{-3}〕；

A_x——x坐标处河流截面积，〔L^2〕；

D_L——纵向弥散系数，〔L^2T^{-1}〕

u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

S——外部的源和漏，〔MT^{-1}〕。

描述各组分的反应和相互作用的方程有：

1）叶绿素-a的浓度

$$c_1=\alpha_0 A \tag{2·294}$$

式中：α_0——叶绿素的比值，〔MM^{-1}〕；

A——藻类的生物量，〔ML^{-3}〕。

2）藻类生物量的增长率

$$\frac{dA}{dt}=\mu_A A-\rho A-\frac{\sigma_1 A}{h_a}-MA-G_Z \qquad (2\cdot295)$$

式中：μ_A——藻类比生长率，〔T^{-1}〕；

ρ——藻类呼吸率，〔T^{-1}〕；

σ_1——藻类沉淀率，〔LT^{-1}〕

h_a——平均河深，〔L〕；

M——藻类死亡率，〔T^{-1}〕；

G_z——由鱼吃的藻类分量，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕。

3）藻类比生长率

$$\mu_A=(\mu_{A,20}\theta^{T-20})\left(\frac{NO_3^-}{NO_3^-+k_{NO_3^-}}\right)\left(\frac{P}{P+k_P}\right)\left(\frac{C}{C+k_C}\right)\frac{1}{\lambda h_a}\ln\left(\frac{k_L+I}{k_L+Ie^{-\lambda h_a}}\right) \qquad (2\cdot296)$$

式中：　$\mu_{A,20}$——20℃时藻类生物量比增长率，〔T^{-1}〕；

θ——温度系数，（1.02—1.06）；

T——实际温度，（℃）；

NO_3^-, P, C——硝酸盐氮，磷酸盐磷和碳的浓度，〔ML^{-3}〕；

$k_{NO_3^-}, k_P, k_C$——氮、磷、碳的半饱和系数，〔ML^{-3}〕；

I——光密度，（兰勒/℃）；

k_L——光的半饱和系数（兰勒/℃）；

λ——河流的消光系数，〔L^{-1}〕。

4）藻类呼吸率

$$\rho_T=\rho_{20}\theta^{T-20} \qquad (2\cdot297)$$

式中：　ρ_{20}——20℃时藻类呼吸率，〔T^{-1}〕；

θ——温度系数。

5）藻类死亡率

$$M=M_N+\beta c \qquad (2\cdot298)$$

式中：M_N——天然死亡率，〔T^{-1}〕；

β——毒性系数，〔$T^{-1}M^{-1}L^3$〕；

c ——河中x处水的组分或毒性含量，〔ML^{-3}〕。

6）浮游生物的比增长率

$$\mu_z = (\mu_{z,20}\theta^{T-20})\left(\frac{A}{k_A+A}\right) \tag{2·299}$$

式中：$\mu_{z,20}$——20℃时浮游生物的比增长率〔T^{-1}〕；

k_A——藻类生物量半饱和速率系数，〔ML^{-3}〕。

7）氨氮的增长率

$$\frac{d[NH_3\text{-}N]}{dt} = \alpha_1\rho A - \beta_1[NH_3\text{-}N] + \frac{\sigma_3}{A_X} \tag{2·300}$$

式中：〔NH_3–N〕氨氮浓度，〔ML^{-3}〕；

α_1——藻类生物量相当氨氮的部分；

σ_3——水底生物对氨氮的反应速度，〔$ML^{-1}T^{-1}$〕；

A_X——x处河流平均断面积，〔L^2〕；

β_1——氨氮的氧化耗氧速率，〔T^{-1}〕。

8）亚硝酸盐氮的增长率

$$\frac{d[NO_2^-\text{-}N]}{dt} = \beta_1[NH_3\text{-}N] - \beta_2[NO_2^-\text{-}N] \tag{2·301}$$

式中：〔NO_2^-—N〕亚硝酸盐氮的浓度，〔ML^{-3}〕；

β_2——亚硝酸盐氮的氧化耗氧速率〔T^{-1}〕

9）硝酸盐氮的增长率

$$\frac{d[NO_3^-\text{-}N]}{dt} = \beta_2[NO_2^-\ N] - \alpha_1\mu_A \tag{2·302}$$

10）正磷酸盐磷的变化率

$$\frac{dP}{dt} = \alpha_2 A(\rho - \mu_A) + \frac{\sigma_2}{A_z} \tag{2·303}$$

式中；α_2——藻类生物量对磷的比例；

σ_2——水底生物对磷的反应速率，〔$ML^{-1}T^{-1}$〕。

11）含碳化合物BOD_0的变化率

$$\frac{d[BOD_c]}{dt}=k_c[BOD_c]-k_s[BOD_c] \quad (2\cdot304)$$

式中：k_c——碳化BOD降解耗氧速率，$[T^{-1}]$；

k_s——BOD的沉淀损失速率，$[T^{-1}]$。

12）水底BOD_b的变化率

$$\frac{d[BOD_b]}{dt}=k_b/A_x \quad (2\cdot305)$$

正中：k_b——水底源的反应速率常数，$[ML^{-1}T^{-1}]$。

13）溶解氧变化率的差分方程

$$\frac{d[DO_x]}{dt}=k_a([DO_x^s]-[DO])+(\alpha_3\mu_A-\alpha_A\rho)A-k_c[BOD_c]$$

$$-k_t/A_x-\alpha_5\beta_1[NH_3-N]-\alpha_6\beta_2[NO_2^--N] \quad (2\cdot306)$$

式中：$[DO_x^s]$——x点处溶解氧的饱和浓度，$[ML^{-3}]$；

$[DO_x]$——x点处溶解氧浓度，$[ML^{-3}]$。

k_a——复氧系数，$[T^{-1}]$；

α_3——每单位藻类生物量光合作用生产的氧，$[MM^{-1}]$；

α_4——每单位藻类生物量因呼吸消耗的氧，$[MM^{-1}]$；

α_5——氧化每单位氨氮消耗的氧，$[MM^{-1}]$；

α_6——氧化每单位亚硝酸盐氮消耗的氧，$[MM^{-1}]$。

14）大肠杆菌变化率

$$\frac{dF}{dt}=k_dF \quad (2\cdot307)$$

式中：F——大肠杆菌数；

k_d——死亡速率系数，$[T^{-1}]$。

15）放射性物质的浓度变化率

$$\frac{dR}{dt} = -\gamma_r R - \gamma_a R \qquad (2\cdot308)$$

式中：γ_r——放射性的衰减率，〔T^{-1}〕；

γ_a——放射性的吸收率，〔T^{-1}〕；

R——放射性物质的浓度，〔Ci/l〕。

QUAL-Ⅱ模型中各种参数的单位，参数值的范围等见表2-13。

表2-13　QUAL-Ⅱ模型的参数

参数名称	单　　位	值的范围	随河段变化否	随温度变化否
α_0	μg(叶绿素a)/mg(A)	50—100	是	否
α_1	mg(N)/mg(A)	0.08—0.09	否	否
α_2	mg(P)/mg(A)	0.012—0.015	否	是
α_3	mg(O)/mg(A)	1.4—1.8	否	否
α_4	mg(O)/mg(A)	1.6—2.3	否	否
α_5	mg(O)/mg(N)	3.0—4.0	否	否
α_6	mg(O)/mg(N)	1.0—1.14	否	否
μ_{max}	d^{-1}	1.0—3.0	否	是
ρ	d^{-1}	0.05—0.5	否	是
β_1	d^{-1}	0.1—0.5	是	是
β_2	d^{-1}	0.5—2.0	是	是
σ_1	m/d	0.15—1.83	是	否
σ_2	mg(P)/(d·m)	变化很大	是	否
σ_3	mg(N)/(d·m)	变化很大	是	否
k_e	d^{-1}	0.1—2.0	是	是
k_a	d^{-1}	0.0—100	是	是
k_s	d^{-1}	变化很大	是	否
k_b	mg/(d·m)	变化很大	是	否
k_d	d^{-1}	0.5—4.0	是	是
v_r	d^{-1}	变化很大	否	否
r_a	d^{-1}	变化很大	否	否
$k_{NO_3^-}$	mg/l	0.2—0.4	否	否
k_p	mg/l	0.03—0.05	否	否
k_l	兰勒/℃	260	否	否

第三章　水质模型的参数估值

水质模型是按照一定的程序建立起来的。虽然按照模型建立的目的、期限与考虑的因素不同，建立的过程也有所不同，但一般来说建立模型的程序有以下几个步骤：（1）模型的构思；（2）数学表达；（3）修正（如由于计算的需要进行差分或有限元分段等）；（4）标定；（5）检验；（6）定型；（7）应用。

在实际工作中，一般都应用已经开发的水质模型。此时，只需要对所选用的水质模型进行结构的识别（Distinction）和参数的估值（Parameter Estimation）。其过程可用图3-1表示。

模型的标定（Calibration）：是利用一组或几组已观测到的输入和输出的数据，对所选用的模型的参数和结构进行调整、修改和定型。

模型的检验（Verification）：是利用另外一组独立的输入和输出数据，试验已标定过的模型，验证模型的预测结果与实测数据是否符合要求。

水质模型的标定与验证，也可统称为水质系统的识别。其目的和任务就在于确定水质模型的结构及其参数，后者也称为参数估值。水质模型的识别与一般工程系统有所不同，一般工程系统可以比较自由地选择它的输入函数，并借助于各种精密仪器对其输出进行测量以取得标定和验证模型所必须的各种数据。而河流水质系统往往由于自然条件与人力、物力的限制，只能在有限的河段、有限的时间内进行离散的观测，即所能得到的数据数量有限又不连续。另一方面，河流水质系统因其排污状况、水文条件的随机干扰多，其模型识别的工作比其它工程系统困难得多。特别需要注意数据的典型性和代表性。要求取得排污（输入）和水质（输

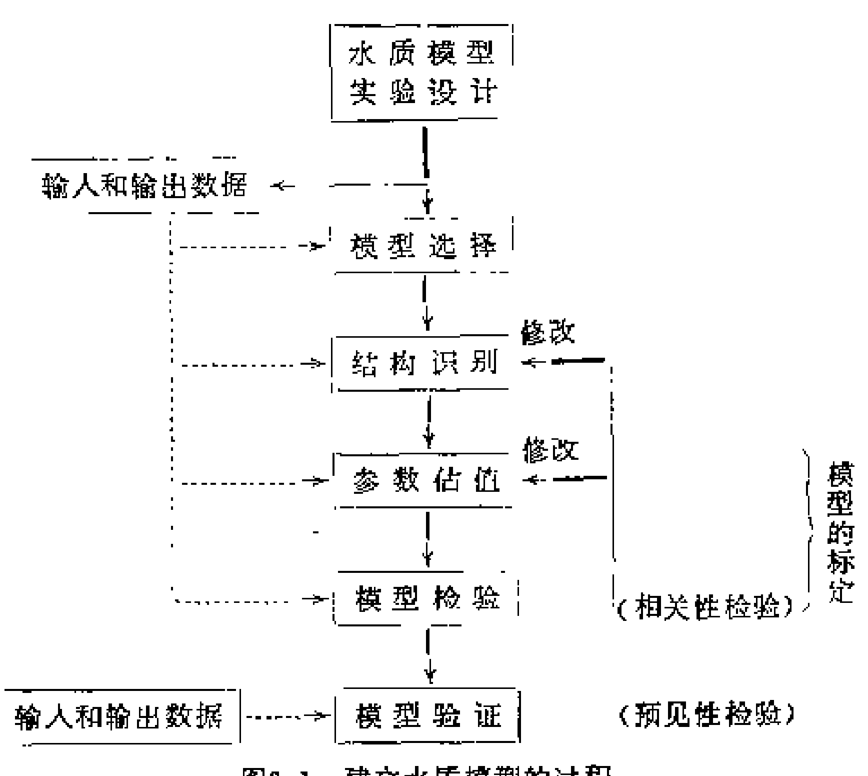


图3-1　建立水质模型的过程

出）的同步（或符合要求的同时）观测数据，也要求取得必要的水质和水量的配套数据。只有从水质模型识别的需要出发，严密地进行水质模型实验设计，才能以少量的资料取得建立预测水质模型的效果。

河流水质系统的识别往往是一个有尝试又有主观判断的模拟计算和迭代的过程。通常根据已有的河流水质信息以及污染物在河流中变化规律的知识，先选择一个初始模型和一组初始参数值。然后把该模型的输出与实际观测值加以比较，如果二者差别甚大，就要根据所提供的信息，调整模型的参数值以减小其误差。如果通过调整模型参数值还不能达到所要求的精度，则需要对模型的结构作相应的变动，甚至重新选择新的水质模型。重复以上的过程，直至模型输出与实测值之间的误差在某种准则下达到满意或合理。在此过程中，对如何确定误差的允许值问题上有一定的主观判断性，它取决于研究问题的性质，所要建立的水质模型的种类和用途、可能获得的数据的范围和可靠性以及人们的

经验和技术。

河流水质模型的参数是河流水体的物理、化学和生物化学动力学过程的常数。这些参数有：k_1、k_2、k_3、k_N、P、R、E、D、L_a、u、h、b 等。确定这些参数值的方法，有单一估值法，还有近十年来发展的同时估值法等。单一估值法可以由实测值来估值和由经验公式来估值。

第一节　水质模型的单参数估值法

一　扩散系数D的估值

根据泰勒的理论，扩散系数的表达式可写成为

$$D = \alpha h u^* \tag{3·1}$$

式中：D——扩散系数，〔L^2T^{-1}〕；

h——水深，〔L〕；

u^*——摩阻流速（或称“剪切流速”），〔LT^{-1}〕；

α——系数，由实验确定。

$$u^* = \sqrt{ghI} \tag{3·2}$$

或

$$u^* = \bar{u}\frac{n\sqrt{g}}{h^{1/6}} \tag{3·3}$$

式中：I——水面比降；

g——重力加速度，〔LT^{-2}〕；

n——河道粗糙系数；

$\bar{u}$——断面纵向平均流速，〔LT^{-1}〕。

对于竖向扩散系数，D_z

$$\bar{D}_z = \alpha_z h u^* = \frac{1}{h}\int_0^h D_z \mathrm{d}z \tag{3·4}$$

对于横向扩散系数D_y

$$D_y = \alpha_y h u^* \tag{3·5}$$

对于纵向弥散系数

$$E_x = \overline{\alpha}_x h u^*$$ (3·6)

式中：D_z、D_y、E_x——数值各不相同，这些系数都是经验的，在不同情况下，有一定的范围。室内试验室测得的α值均偏小，一般不能直接应用于天然河流。

（一）扩散系数的经验公式

1．竖向扩散系数D_z

对于稳定的、均匀的明渠水流

$$D_z = 0.67 h u^*$$ (3·7)

2．横竖扩散系数D_y

（1）顺直河段的D_y

曾在直的矩形水槽和顺直河段中进行过许多试验，表(3-1)、(3-3）汇集了部分代表性的试验观测结果。

据菲希尔（Fischer)的统计分析，大多数情况$\alpha_z = 0.1$—0.2，许多试验的平均值约为0.15。有些灌溉渠道达0.24—0.25。

奥科耶（Okoye）曾就河道的宽深比（$\frac{b}{h}$）与横向扩散系数D_y进行了试验统计，其结果如图3-2。

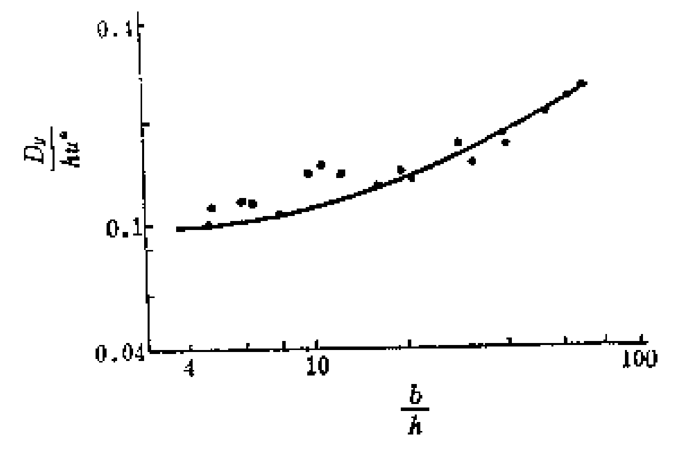


图3-2　河宽深比与横向扩散的关系曲线

（引自1970年奥科耶报告）

奥科耶还对D_y随水深的变化关系进行过试验，得到如图3-3的结果。在水面处$\alpha_y = 0.20$，而在平均水深处$\alpha_y = 0.15$。

菲希尔认为对顺直河段可采用：

$$D_y = 0.23hu^* \tag{3·8}$$

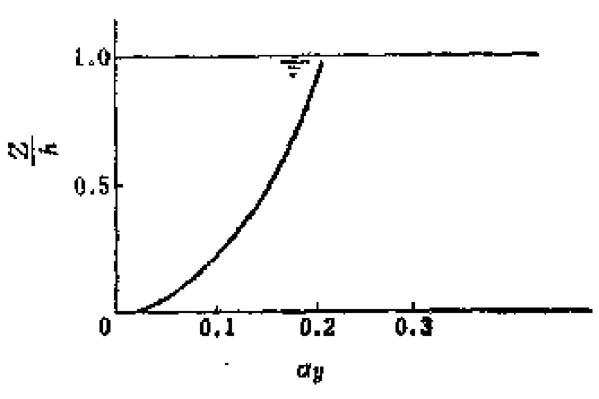


图3-3　横向扩散系数的竖向分布

（2）弯曲河段的D_y

天然河流常常是很不规则的，并非都是矩形断面。它的变化特征有：1）在横向和纵向上水深变化较大；2）在平面上多数是顺直而微弯，有时有急锐的河弯；3）两岸不规则，如：有突出的河岸或有整治河道的构筑物（有丁坝或顺坝等）。河岸的状况对横向扩散系数有较大的影响。

菲希尔1969年得到下列弯曲河段扩散系数的经验关系：

$$\frac{D_y}{hu^*} \propto \left(\frac{\bar{u}}{u^*}\right)^2 \left(\frac{h}{R}\right)^2 \tag{3·9}$$

式中：h ——平均水深；

R——河弯的曲率半径。

约特苏库尔（Yotsukura）等人根据密苏里（Missouri）河弯道资料

$$\frac{D_y}{hu^*} = 1750\left(\frac{\bar{u}}{u^*}\right)^2 \left(\frac{h}{R}\right)^2 \tag{3·10}$$

菲希尔提出弯曲河道及不规则的河岸，横向扩散的 $\alpha_y \geqslant 0.4$ 实用上选0.4—0.8之间。即采用

$$D_y = 0.6hu^* \tag{3·11}$$

由于横向扩散的复杂性，它不同于竖向扩散系数和纵向弥散系数，横向扩散系数的变动较大，其误差可达±50%，因此实地观测是很有必要的。

表3-1—表3-3是各种观测成果的汇集。

表3-1　天然河流横向扩散系数D_y

试验人，河名	河宽 b (m)	宽深比 b/h (m/m)	平均流速 $\bar{u}$ (m/s)	剪切流速 u_* (m/s)	阻力系数 f	横向扩散系数D_y (m^2/s)	$\frac{D_y}{bu_*}$	$\frac{D_y}{hu_*}$	弯曲率 S
格洛弗，哥伦比亚河 (Glover, Columbia)	305	100	1.35	0.088		0.186	6.9×10^{-3}	0.69	
杨特苏库拉等密苏里河 (Yotsukura等, Missouri)	183	66.7	1.74	0.073	0.014	0.100	7.5×10^{-3}	0.50	1.1
杨特苏库拉等，南部河 (South)	18.3	46.2	0.18	0.040	0.220	0.046	6.3×10^{-3}	0.29	1.0
杨特苏库拉等，阿里斯托-费德运河(Aristo Feeder)	18.3	22.3	0.67	0.026	0.069	0.093	8.2×10^{-3}	0.22	1.0
杨特苏拉等，贝纳多渠-科维昂塞 (Bernado-Coveyance)	20.1	28.7	1.25	0.061	0.020	0.130	10.6×10^{-3}	0.30	1.0
贝尔特欧斯，阿萨巴斯加河段1 (Beltaos, Athabasca)	373	170	0.95	0.056	0.028	0.092	4.4×10^{-3}	0.75	1.0
贝尔特欧斯，阿萨巴斯加河段2 (Beltaos, Athabasca)	320	156	0.86	0.079	0.067	0.066	2.6×10^{-3}	0.41	1.2
贝尔特欧斯，比萨斯喀彻温 (North Saskatchewan)	213	137	0.58	0.080	0.152	0.031	1.8×10^{-3}	0.25	1.0
贝尔特欧斯，鲍河(Bow)	104	104	1.05	0.139	0.143	0.085	5.9×10^{-3}	0.61	1.1
贝尔特欧斯，比弗河 Beaver)	42.7	44.6	0.50	0.044	0.062	0.042	22.4×10^{-3}	1.00	1.3
赛尔等，密苏里河 (Sayre等, Missouri)	234	59.1	1.98	0.085	0.015	1.110	55.8×10^{-3}	3.30	2.1
劳等，大河(Lau, Grand)	59.2	117	0.35	0.069	0.314	0.009	2.2×10^{-3}	0.26	1.1
S.贝尔特欧斯，阿萨巴斯加河 (S.Beltaos, Athabasca)	373	169.5	0.95	0.0557		0.093	4.5×10^{-3}	0.76	Q=776 (m^3/s)
S.贝特欧斯，比弗河 (Beaver)	42.7	44.5	0.50	0.0444		0.043	22.4×10^{-3}	1.01	Q=200 (m^3/s)
S.贝尔特欧斯，阿萨巴斯加河 (Athabasca)	320	156.1	0.86	0.0789		0.067	2.6×10^{-3}	0.41	Q=566 有弯曲
菲希尔，灌溉渠(沙底)(Fischer)	18.3	27.4—26.8	0.63—0.66	0.061—0.063		0.0102		0.24—0.25	

表3-2 试验室明渠的横向扩散系数D_y

试验人	试验明渠底部糙度	河宽 b (m)	平均水深 h (cm)	平均流速 $\bar{u}$ (cm/s)	剪切流速 u_* (cm/s)	横向扩散系数 D_y (cm²/s)	$\frac{D_y}{hu_*}$
卡利斯凯和皮安 (Kalinske & Pien)(1943)	光 滑	0.69	15.8	94.5	5.19	6.56	0.03
埃尔德(Elder)(1959)	光 滑	0.36	1.2	21.6	1.59	0.31	0.16
塞尔和线格(Sayre & Chang)(1968)	档木底	2.83	14.8—37.1	2.35—37.1	3.81—6.01	9.6—36.9	0.16—0.18
沙利文(Sullivan)(1968)	光 滑	0.76	7.3—10.2	15.3—22.9	0.83—1.29	0.9—1.18	0.11—0.13
奥科耶(Okoye)(1968)	光 滑	0.85	1.5—17.3	27.1—42.8	[illegible].6—2.2	0.64—2.9	0.09—0.20
奥科耶(1970)	光 滑	1.10	1.7—22	30.0—50.4	1.4—2.6	0.79—3.3	0.11—0.21
	砾	1.10	6.8—17.1	35.3—42.8	3.6—5.2	4.8—7.5	0.11—0.11
普赖切(Prych)(1970)	光 滑	1.10	4—11.1	35.4—46.0	1.9—2.0	1.1—3.6	0.14—0.16
	金属条	1.10	3.9—6.4	37.3—45.9	3.7—4.0	2.0—3.5	0.11
米勒和理查森 (Miller & Richardson)(1974)	矩形块	0.597	12.5—13.2	30.5—81.4	3.0—16.3	3.7—36.3	0.10—0.18
劳和克里斯纳旁 (Lau & Krishnappon)(1977)	光 滑	0.60	3.9—5.0	15.5—33.7	0.9—2.0	0.74—1.4	0.16—0.20
	0.4mm砂	0.45—0.6	1.4—4.0	19.7—20.3	1.6—2.1	0.34—0.88	0.11—0.14
	2.0mm砂	0.3	1.6—3.4	20—20.4	1.9—2.4	0.74—0.92	0.14—0.20
	2.7mm砂	0.45—0.6	1.3—3.9	19.5—20.4	1.8—2.8	0.59—1.16	0.13—0.26

表3-3 弯曲河段及不规则河岸的横向扩散系数

试验人	河名	河渠状况	河宽 b (m)	水深 h (m)	平均流速 u (m/s)	剪切流速 u^* (m/s)	D_y (m²/s)	$\frac{D_y}{h u_*}$
杨特苏库拉(1970年)	密苏里河	连续弯曲	200	2.7	1.75	0.074	0.12	0.6
霍利和亚伯拉罕(1973年)	试验室	两岸有0.15m长丁坝	2.2	0.097	0.11			0.36—0.49
(Holley & Abraham)	(光壁、光底)	两岸有0.5m长丁坝	2.2	0.097	0.11			0.3—0.4
霍利和亚伯拉罕	艾瑟尔河模型 (Ijsse)	两岸有丁坝，微坝	1.22	0.9	0.13	0.0078		0.45—0.77
霍利和亚伯拉罕	艾瑟尔河	两岸有丁坝、微坝	69.5	4.0	0.96	0.075		0.51
麦凯(1970年) (Mackay)	马更些河 (Mackenzie)	有微湾.有沙洲,有沙滩	1240	6.7	1.77	0.152	0.67	0.66
杨特苏库拉等 (1973, 1976年)	密苏里河库珀电站下游(Cooper)	有90°及180°河湾	210—270	4	5.4	0.08	1.1	3.4
杰克曼和杨特苏库拉 (1977年) (Jackman & Yotsukura)	波托马克河 (Potomac) 迪克尔森电站下游 (Dickerson)	船续微弯(60°)	350	0.73—1.74	0.2—0.58	0.033—0.051		0.52—0.65

【例题3-1】

某顺直河段，平均水深$h=2\text{m}$，河床水力坡降$I=0.005$，估算其竖向扩散系数D_z和横向扩散系数D_y。若该河段为弯曲河道段，估算其横向扩散系数D_y。

解：

摩阻流速 $u^*=\sqrt{ghI}=\sqrt{9.81\times2\times0.005}$
$=0.313\text{m/s}$

1）顺直河段

$D_z=0.067hu^*=(0.067)(2)(0.313)=0.42\ (m/s^2)$

$D_y=0.23hu^*=(0.23)(2)(0.313)=0.144\ (m/s^2)$

2）弯曲河段

$D_y=0.6hu^*=(0.6)(2)(0.313)=0.376\ (m/s^2)$

二 纵向弥散系数E_x的估算

（一）纵向弥散系数E_x的方程推导及应用范围。

河流中投放一个污染源，其河水污染物浓度分布为$c(x、y、z、t)$，水质模型的基本方程为

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u(y,z)\frac{\partial c}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)\qquad(3\cdot12)$$

式中：u——点的流速〔LT^{-1}〕，

D_y，D_z——横向和竖向扩散系数，〔L^2T^{-1}〕。

若定义河流断面的平均值

$$\bar{c}=\frac{1}{A}\int_0^b dy\int_0^h c(x,y,z,t)dz\qquad(3\cdot13)$$

$$\bar{u}=\frac{1}{A}\int_0^b dy\int_0^h u(y,z)dz\qquad(3\cdot14)$$

$$c=\bar{c}+c'\qquad(3\cdot15)$$

$$u=\bar{u}+u'\qquad(3\cdot16)$$

式中：b——河宽；h——水深；A——断面积；c,u——河流质

点的河水污染物浓度与流速；

$\bar{c}$，$\bar{u}$——河流断面的河水污染物平均浓度与平均流速；

c'，u'——某点浓度与流速对于平均值 $\bar{c}$，$\bar{u}$ 的偏离值。

在(3·12)式中将上述平均值和偏离值代替点的实际浓度与流速，并经推导整理，可得到河流平均的纵向弥散系数方程：

$$E_x = -\frac{1}{A}\int_0^b q'(y)\mathrm{d}y\int_0^y \frac{1}{D_y h(y)}\mathrm{d}y\int_0^y q'(y)\mathrm{d}y \qquad (3\cdot17)$$

式中：q′(y)—横向坐标上由于流速分布不均相对于平均流速而言的）流量偏差值，

$$q'(y) = \int_0^{h(y)} u'(z,y)\mathrm{d}z;$$

其它符号同上

用纵向弥散系数表达一维河流水质的基本方程为

$$\frac{\partial\bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial\bar{c}}{\partial x} = E_x\frac{\partial^2\bar{c}}{\partial x^2} - kc \qquad (3\cdot18)$$

对于稳态的连续源，由于$\partial c/\partial t = 0$，可得积分解为

$$\bar{c}(x) = \bar{c}_0\exp\left[\frac{\bar{u}}{2E_x}\left(1-\sqrt{1+\frac{4kE_x}{\bar{u}^2}}\right)\right]x \qquad (3\cdot19)$$

或
$$c(x) = c_0\exp\left(-\frac{k}{u}x\right)\left[\frac{\sqrt{a+1}-1}{\frac{a}{2}}\right] \qquad (3\cdot20)$$

式中：c_0——断面平均的起始浓度；

k——污染物降解速率系数；

c——断面平均浓度；

$a = \frac{4E_x k}{u^2}$；

u——断面平均流速。

由于断面混合扩散的特性长度，$x_d \propto u\frac{b^2}{D_y}$，根据实验，当纵向弥散符合正态分布时（即应用纵向弥散方程）；$x_l - \frac{0.4ub^2}{D_y}$；

而对可降解物的衰减特性长度$x_k=\frac{u}{k}$。（即物质降解为c_0/c时的长度。因此可用这两个特性长度$x_k:x_d$来衡量弥散作用的影响。

存在如下两种可能：

1）当$x_k:x_d>1$，并近似地取$E_x=0.015\frac{u^2b^2}{hu^*}$和$D_y=0.4hu^*$，可估算得

$$a=\frac{4E_xk}{u^2}=\frac{(4)(0.015)(u^2b^2)k}{(hu^*)u^2}=\frac{(0.06)}{\left(\frac{x_k}{x_d}\right)}\doteq0.06$$

这时方程（3·20）中的方括号项为0.985，即

$$c_x\doteq c_0\exp\left(-\frac{k}{u}x\right)$$

由此可知，此种情况可不必考虑弥散，而只需考虑物质的降解。

2）当$x_k:x_d<1$，则由于可降解物质在未达到断面混合之前，已降解得差不多了，也就不能应用式（3·18）。

总之，上述分析说明，在稳态条件下，可以忽略弥散作用。

（二）实测法估算Ex

1．河流的纵向弥散系数E

菲希尔提出用近似差分积分公式代替式（3·17），（参见图3-4）。

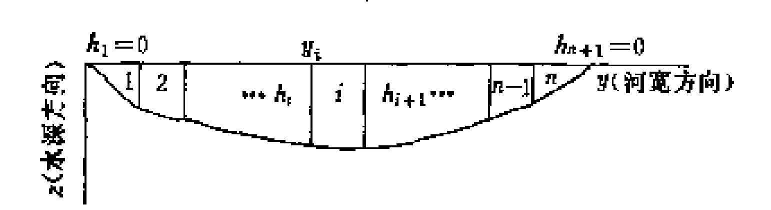


图3-4　河流断面单元实测水深与流速

$$E=-\frac{1}{A}\sum_{k=2}^{n}q_k'\Delta y_k\left[\sum_{j=2}^{k}\frac{\Delta y_j}{D_{yj}h_j}\left(\sum_{i=1}^{j-1}q_i'\Delta y_i\right)\right]\tag{3·21}$$

当河段为均匀顺直河段，Δy_i取成定常值时，$\Delta y_i=\Delta y$，式（3·21）可改为

$$E = -\frac{(\Delta y)^3}{0.23u^* \bar{A}} \sum_{k=2}^{n} q_k' \left[\sum_{j=2}^{k} \frac{1}{h_j^2} \left(\sum_{i=1}^{j-1} q_i' \right) \right] \tag{3•22}$$

$(i=1,\cdots,n \quad ; \qquad j,k=2,\cdots,n)$

式中：A——总过水断面积，m^2，$A=\sum_{i=1}^{n} h_i \Delta y_i$；

n——河宽分隔为Δy的单元数；

$\bar{h}_i$——第 i 单元的平均水深，m，$\bar{h}_i=\frac{h_i+h_{i+1}}{2}$；

h_i, h_{i+1}——第 i 单元左右两边水深，m；

$u_i, \bar{u}$——第 i 单元与全断面的平均流速，m/s；

q_i——第 i 单元单位宽度上流量偏差，$m^3/(s \cdot m)$

$q_i'=\bar{h}_i(\bar{u}_i-\bar{u})$

D_{yl}——横向扩散系数，m^2/s，

菲希尔提出横向扩散系数可采用埃尔德公式$D_{yl}=0.23u^*\bar{u}_i$（对均匀顺直河段）或$D_{yl}=0.6u^*\bar{h}_i$（对非顺直河段）；

u^*——摩阻流速，m/s；$u^*=\sqrt{g\bar{h}I}$

g——重力加速度，m/s^2；

I——水力坡降；

$\bar{h}$——河流断面的平均水深，m。

根据河流某一断面上各单元的水深h_i和流速u_i的实测资料，可用上式计算得到弥散系数值。为使计算结果足够精确，河宽划分的单元数最好满足$n \geq 20$个。

【例题3-2】

某河 $A=13.84m^2$，$\bar{u}=0.533m/s$，$u^*=0.1m/s$，$b=19.05m$。划分为25单元（$n=25$，$\Delta y=0.762m$）。测得如表3-4的数据。

求：纵向弥散系数E。

解：表中各列的计算过程如下

$(4)_1 \quad q_1' \Delta y=\frac{h_1+h_2}{2}(\bar{u}_1-\bar{u})\Delta y$

$=\frac{(0+0.305)}{2}(0.046-0.533)(0.762)=-0.057$

$(4)_2 \quad q_2' \Delta y = \frac{h_2 + h_3}{2}(\bar{u}_2 - \bar{u})\Delta y$

$= \frac{(0.305 + 0.655)}{2}(0.076 - 0.533)(0.762) = -0.167$

$(4)_3 \quad q_3' \Delta y = \frac{h_3 + h_4}{2}(u_3 - \bar{u})\Delta y$

$= \frac{(0.655 + 0.793)}{2}(0.107 - 0.533)(0.762) = -0.264$

⋮

$(5)_1 \quad \sum_{i=1}^{2-1} q_i' \Delta y = (4)_1 = -0.057$

$(5)_2 \quad \sum_{i=1}^{3-1} q_i' \Delta y = (4)_1 + (4)_2 = (-0.057) + (-0.167) = -0.224$

$(5)_3 \quad \sum_{i=1}^{4-1} q_i' \Delta y = (4)_1 + (4)_2 + (4)_3 = (-0.224) + (-0.264)$

$= -0.488$

⋮

$(6)_1 \quad 0$

$(6)_2 \quad \sum_{j=2}^{2} \frac{\Delta y}{0.23 u^* h_j^2} \sum_{i=1}^{2-1} q_i' \Delta y = \sum_{j=2}^{2}\left(\frac{0.762}{0.23 \times 0.1 \times h_2^2}\right)\sum_{i=1}^{2-1} q_i' \Delta y$

$= \frac{(33.13)(-0.057)}{(0.3048)^2} \doteq -20.317$

$(6)_3 \quad \sum_{j=2}^{3} \frac{\Delta y}{0.23 u^* h_j^2} \sum_{i=1}^{3-1} q_i' \Delta y = \left[\frac{(33.13)(-0.224)}{(0.655)^2}\right.$

$\left. + (-20.317)\right] = -37.699$

⋮

则 $E = -\frac{1}{A}\sum_{k=2}^{25}\left[(4) \times (6)\right] = \frac{304.08}{13.84} = 21.97 \ \mathrm{m^2/s}$

表3-4　纵向弥散系数E的计算表

i	(1) y_i m	(2) $\bar{u}_i$ m/s	(3) h_i m	(4) $q'_i\Delta y$ m³/s	(5) $\sum_{i=1}^{j-1} q'\Delta y$ m³/s	(6) $\sum_{j=2}^{k}\frac{\Delta y}{0.23u^*h_i^2}\sum_{i=1}^{j-1} q'_i\Delta y$ m
1	0	0.046	0	−0.057	−0.057	0
2	0.762	0.076	0.3048	−0.167	−0.224	−20.317
3	1.524	0.107	0.655	−0.264	−0.488	−37.699
4	2.284	0.128	0.793	−0.277	−0.765	−62.103
5	3.048	0.198	1.006	−0.261	−1.026	−86.401
6	3.810	0.412	1.036	−0.095	−1.094	−117.41
7	4.572	0.549	1.012	+0.011	−1.082	−153.04
8	5.334	0.701	0.957	+0.119	−0.963	−192.45
9	6.096	0.716	0.914	+0.128	−0.835	−230.86
10	6.858	0.732	0.917	+0.141	−0.694	−263.94
11	7.620	0.762	0.945	+0.162	−0.532	−289.89
12	8.382	0.777	0.911	+0.164	−0.369	−311.27
13	9.144	0.823	0.847	+0.182	−0.186	−328.41
14	9.906	0.838	0.805	+0.185	-1.1×10^{-3}	−338.03
15	10.67	0.808	0.789	+0.167	+0.166	−338.11
16	11.43	0.747	0.811	+0.140	+0.306	−329.68
17	12.19	0.701	0.911	+0.116	+0.422	−317.38
18	12.95	0.655	0.908	+0.082	+0.505	−300.31
19	13.72	0.564	0.866	+0.020	+0.524	−277.83
20	14.48	0.457	0.847	−0.049	+0.476	−253.47
21	15.24	0.335	0.829	−0.118	+0.358	−230.37
22	16.00	0.213	0.728	−0.157	+0.201	−207.85
23	16.76	0.122	0.555	−0.127	+0.074	−186.02
24	17.53	0.061	0.256	−0.065	$+9.3\times10^{-3}$	−148.15
25	18.29	0.031	0.104	$+1.2\times10^{-3}$	+0.0107	−118.28

上述手算过程，可编成计算机语言设计程序。

2． 河口的纵向弥散系数E

国外比较普遍地应用实测盐的浓度（或氯离子）法来估计E。即实测河口不同距离处水体的盐的浓度或氯离子的浓度，通

过统计回归取得其E值。

盐（或氯化物）是惰性物（不发生衰减变化）。其迁移方程应为

$$E\frac{d^2S}{dx^2}-u\frac{dS}{dx}=0 \tag{3·23}$$

式中：E——河口的纵向弥散系数；

S——离河口某处断面的盐的浓度；

x——离河口的距离。

当 $x \geqslant 0$（即河口外海洋中）海水的盐浓度为常数 $S=S_0$时解得均匀河口盐的浓度分布关系为

$$x \geqslant 0 \qquad S=S_0 \tag{3·24}$$

$$x<0 \qquad S=S_0 \ \exp\left(-\frac{ux}{E}\right) \tag{3·25}$$

可用图 3-5 表示河口盐浓度随距离的变化情况。

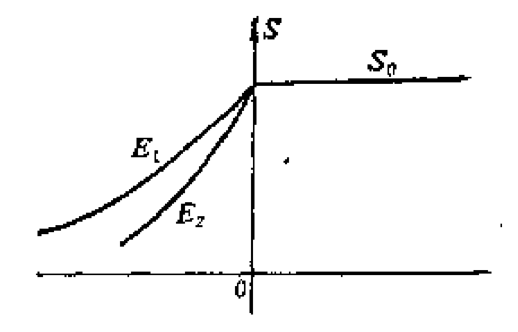


图3-5 均匀河口盐浓度的分布关系

利用一组x_i处测得的S_i值，在半自然对数座标纸上（纵轴为$\ln S_i/S_0$，横轴为距离x_i）可得到一条斜率为u/E的近似直线，(如图3-6)。由u/E可求得E值。

图3-6 $\ln(S_i/S_0)x_i$与u/E的关系

上述直线的回归方程为

$$\frac{u}{E}=\frac{\ln S_0\sum x_i-\sum x_i\ln S_i}{\sum x_i^2} \tag{3·26}$$

$$E=\frac{u\sum x_i^2}{\ln S_0\sum x_i-\sum x_i\ln S_i} \tag{3·27}$$

式中：u——河口上游断面的平均流速，m/s；

S_0——海水中盐的浓度（或氯离子浓度）mg/l，

S_i——x_i断面的河水中盐的浓度，mg/l；

x_i——离河口的距离，m；

E——纵向弥散系数，m^2/s。

（三）经验公式估算E_x

1. 河流的纵向弥散系数E_x

埃尔德（Elder）曾在水深为1.5cm的明渠中试验，验证了以下的河流纵向弥散系数计算式：

$$E_x = \alpha_x h u_* \tag{3·28}$$

据埃尔德理论计算$\alpha_x = 5.9$，试验得$\alpha_x = 6.3$，两者相当吻合。

式中：h——河流平均水深，m；

u^*——摩阻流速，m/s；

$$u^* = \sqrt{ghI}$$

g——重力加速度，m^2/s；

I——水力坡降；

α_x——经验系数，$\alpha_x = \frac{E_x}{hu^*}$。

但是，在天然河流中，许多人的现场观测得到的α_x变化较大，对河宽为15—60m的天然河流，α_x在14—650之间（多数为140—300）。对河宽达200m的美国密苏里河，α_x达7500。其他一些试验渠的α_x也都大于5.9。（详见表3-5）。

由于天然河流有时很不规则，很难作出定量分析。菲希尔提出以下式作初步近似估算之用：

$$E_x = 0.011\bar{u}^2 b^2/(hu^*) \tag{3·29}$$

式中：$\bar{u}^*$——平均流速，m/s；

b——河宽，m；

h——水深，m；

u^*——摩阻流速，m/s，$u^* = \sqrt{ghI}$

I——水力坡降；

g——重力加速度。

表（3-5）中最后一列是用上式估算的E_x值。

表3-5 河渠纵向弥散系数E_x的试验测定

文献	河渠名	河深 h (cm)	河宽 b (m)	平均流速 u (cm/s)	剪切流速 u^* (cm/s)	实验得 E_x (m²/s)	$\frac{E}{hu^*}$	估算的 E_x (m²/s)
托马斯(1958年)	芝加哥运河(Chicago)	807	48.8		1.91	3	20	
加里福尼亚州(1962年)	萨克拉门托河 (Sacramento)	400			5.1	15	74	
奥温斯(Owens等)(1964年)	德文特河(Derwent)	25			14	4.6	131	
格劳弗(Glover)(1964年)	南普雷梯河 (South Platle)	46			6.9	16.2	510	
斯恰斯脱(1965年) (Schuster)	尤马-梅萨粗边界试验渠运河(Yuma Mesa)	345			3.45	0.76	8.6	
菲希尔(1967年)		3.5	0.40		2.02	0.123	174	0.13
		4.7	0.43		3.59	0.253	150	0.25
		3.5	0.40		3.51	0.415	338	0.37
		3.5	0.34		3.48	0.250	205	0.25
		2.1	0.33		3.28	0.400	392	0.45
		2.1	0.19		3.88	0.220	270	0.16
菲希尔(1968年)	格林-达瓦密许河 (Green-Duwamish)	110	20		4.9	6.5—8.5	120—160	7.8
	科珀格克-克里克上游 (Copper Creek)	40	19	16	11.6	9.9	220	2.8
	波威尔河(Powell)	85	34	15	5.5	9.5	200	
	克林茨河(Clinch)	58	36	71	4.9	8.1	280	30
	奥茨爱勒运河 (Coachella)	150	24	21	4.3	9.6	140	3.9

续表3-5

文献	河渠名	河深 h (cm)	河宽 b (m)	平均流速 $\bar{u}$ (cm/s)	剪切流速 u_* (cm/s)	实验的 E_x (m²/s)	$\frac{E}{hu_*}$	估预的 E_x (m²/s)
杨特苏库拉等(1970) (Yotsukuna)	密苏里河	270	200		7.4	1500	7500	
高特弗雷等(1970)	科珀克-克里克(下游)	49	16	0	8.0	9.5—20	245—500	11.4—6.0
(Godifrey)		85	18		10.0	21	250	28
傅考开(1971) (Fukuoka)	连续弯曲矩形水槽。光壁、光和粗底，(25次试验)	2.3—7.0	0.13—0.25		1.1—2.7		5.8—35	
麦克亏凡和开弗(1974)	贝约—阿纳康康河	44	26	34	6.7	33	524	13
(Mcquivey & Keefer)	(Bayou-Anacoco)	91	37	40	6.7	39	640	38
	努萨克河(Noo Hsack)	76	64	67	27	35	171	98
	汶特-别格霍河	110	59	88	12	42	318	232
	(Wind/Bighor)	216	59	155	17	160	436	340
	约翰戴河(John Day)	58	25	101	14	14	172	88
	科米特河(Comite)	247	34	82	18	65	146	20
	萨拜因河(Sabine)	43	16	37	5	14	651	16
		204	104	58	5	315	3100	330
		475	127	64	8	670	1763	190
	亚德基河(Yadkin)	2.35	70	43	10	110		44
		3.84	72	76	13	260		68

2. 河口的弥散系数

粗估的经验公式有

(1) $E = 155.87 u_{max}^{4/3}\ m^2/s = 5.2 u_{max}^{4/3}\ mile^2/d$ (3·30)

(2) $E = 620.8 u_{max}^2\ m^2/s = 20.7 u_{max}^2\ mile^2/d$ (3·31)

式中：u_{max}——河口入海处的最大潮速* (nmile/h)。

实测的弥散系数E值可参考表3-6。从表中可看出E一般在30—330m^2/s之间，离海口越远E值越小。

表3-6 弥散系数E的参考值

河流名称	河口位置	测定E所用示踪物	E (m^2/s)
特拉华(Delaware)(美)	上游	氯化物	60—210
	下游至海口	氯化物	210—330
波塔马克(Potamac)(美)	上游无盐区(40km河段)	染色剂	6—18
	中游40km河段	氯化物	18—180
	下游80km河段	氯化物	180—300
维克萨沙(WaccaSCasa)(美)	墨西哥河口小海湾	氯化物	60—81
	上游无盐区	染色剂	12—24
N. Y港(美)	高盐度港湾	氯化物	300—720
詹姆斯(James)(美)	无盐度段	亚硫酸盐	270—330
赫德森(Hudson)(美)	距海口40—80km	氯化物	240
塞文(Severn)(英)	低流量	盐度	(夏) 42—120
	高流量	盐度	(冬) 123—530
泰晤士(英)	低流量	盐度	51—48
	高流量	盐度	330
非感潮河流(美)		放射性	0.75—39

【例题3-3】某河$h = 0.91m$，$b = 37m$，$u = 0.4m/s$，$I = 5\times 10^{-4}$，估算E_x

解：河流摩阻流速 $u^* = \sqrt{ghI}$

$$= \sqrt{(9.81)(0.91)(5\times 10^{-4})} = 0.067\ m/s$$

* 1海里/小时(n mile/h) = 1.853 km/h。

所以$E_{*}=\frac{0.011b^{2}u^{2}}{hu^{*}}$

$$=\frac{(0.011)(37)^{2}(0.4)^{2}}{(0.91)(0.067)}=39.5\ m^{2}/s。$$

【例题3-4】 某河口入海处最大潮速$u_{max}=0.71nmile/h=1.316km/h$，粗估算河口处的$E$。

解：

（1）采用$E=155.87u^{4/3}_{max}\quad m^{2}/s$

$$E=(155.87)(0.71)^{4/3}=98.7m^{2}/s$$

（2）采用$E=620.8u^{2}_{max}\quad m^{2}/s$

$$E=(620.8)(0.71)^{2}=312.8m^{2}/s$$

可见这两种公式计算结果相差达三倍。说明这种经验公式只能作进一步估算前的参考之用。

【例题3-5】 某河口上游河段测得盐的浓度与流速数据如表3-7。海水中盐的浓度为15000mg/l。

表3-7　某河口各断面河水的盐度与流速

断　面　号		4	3	2	1
离河口距离x_i	(km)	60	45	30	15
流　　速　u_i	(m/s)	0.21	0.24	0.27	0.3
盐的浓度　S_i	(mg/l) ×10⁴	0.56	0.99	1.26	1.4

求：纵向弥散系数的估值。

解：由$S_0=15000mg/l$及上述资料可得

断　面	4	3	2	1
ln (S_i/S_0)	−0.985	−0.416	−0.174	−0.068

即可由ln (S_i/S_0) 与x画得如图（3-7）的近似直线。

直线的斜率：

$$\frac{\bar{u}}{E}=\frac{0.985-0.068}{(60-15)\times10^{3}}=0.0204\times10^{-3}$$

则 $$E=\frac{u}{0.0204\times10^{-3}}=\frac{0.255\times10^{3}}{0.0204}\doteq12.5\times10^{3}\ \mathrm{m^2/s}$$

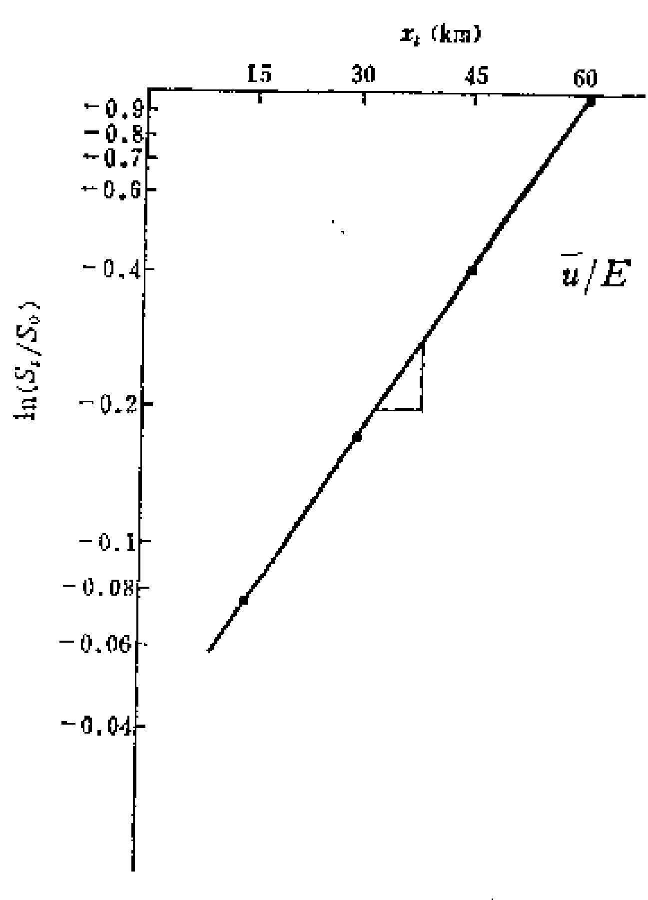


图3-7 $\ln(S_i/S_0)$与x的关系

三 BOD衰减系数k_1和k_N的估值

(一) 由BOD的实验室测定值来估算k_1

1．在实验室内测得的一组不同时间t时，河水 样 品各相应的需氧量y值。由此可求得$k_{1(实验室)}$。由于河 流 中生化降解条件不同，$k_{1(河流)}$都要大于$k_{1(实验室)}$。主要是由于河流紊动等水力学条件引起的。可以用以下的波斯柯（Bosko）经验公式进行修正：

$$k_{1(河流)}=k_{1(实验室)}+\alpha\frac{u}{h} \tag{3·32}$$

式中： u——平均流速，〔LT^{-1}〕；

h——平均水深，〔L〕；

α——低流速估算$\alpha \doteq 0.1$，高流速$\alpha \doteq 0.6$。

狄欧乃（Tierney）和杨格（Young）1974年提出上述 α 系数是河流坡度 i 的函数，两者的关系是

i(m/km)	0.33	0.66	1.32	3.3	6.6
α	0.1	0.15	0.25	0.4	0.6

2．k_1(实验室)的估算方法

（1）最小二乘法

塞里奥特（Theriault）提出把

$$y = L_0(1 - e^{-k_1 t}) \tag{3·33}$$

转化为 $y = L_0〔1 - e^{-(k_1' + h)t}〕$ （3·34）

式中： k_1'——待估k_1的近似值；

h——允许偏差值。

公式（3·34）可转化为

$$y = L_0〔1 - e^{-k_1' t}\, e^{-ht}〕 \doteq L_0〔1 - e^{-k_1' t}(1 - ht)〕$$

$$= L_0(1 - e^{-k_1' t}) + (L_0 h)\, t e^{-k_1' t}$$

$$= a \cdot f_1 + d \cdot f_2$$

按最小二乘法解得

$$a = \frac{\Sigma f_2^2 \Sigma f_1 y - \Sigma f_1 f_2 \Sigma f_2 y}{\Sigma f_1^2 \Sigma f_2^2 - (\Sigma f_1 f_2)^2} \tag{3·35}$$

$$d = \frac{\Sigma f_1^2 \Sigma f_2 y - \Sigma f_1 f_2 \Sigma f_1 y}{\Sigma f_1^2 \Sigma f_2^2 - (\Sigma f_1 f_2)^2} \tag{3·36}$$

式中：
$$\left\{\begin{array}{l} a=L_0; \quad d=L_0 h; \\ f_1=1-e^{-k_1' t}, \quad f_2=t e^{-k_1' t} 。\end{array}\right. \tag{3·37}$$

求解a，d 方法：（迭代试算）见图 3－8 所示的计算框图。

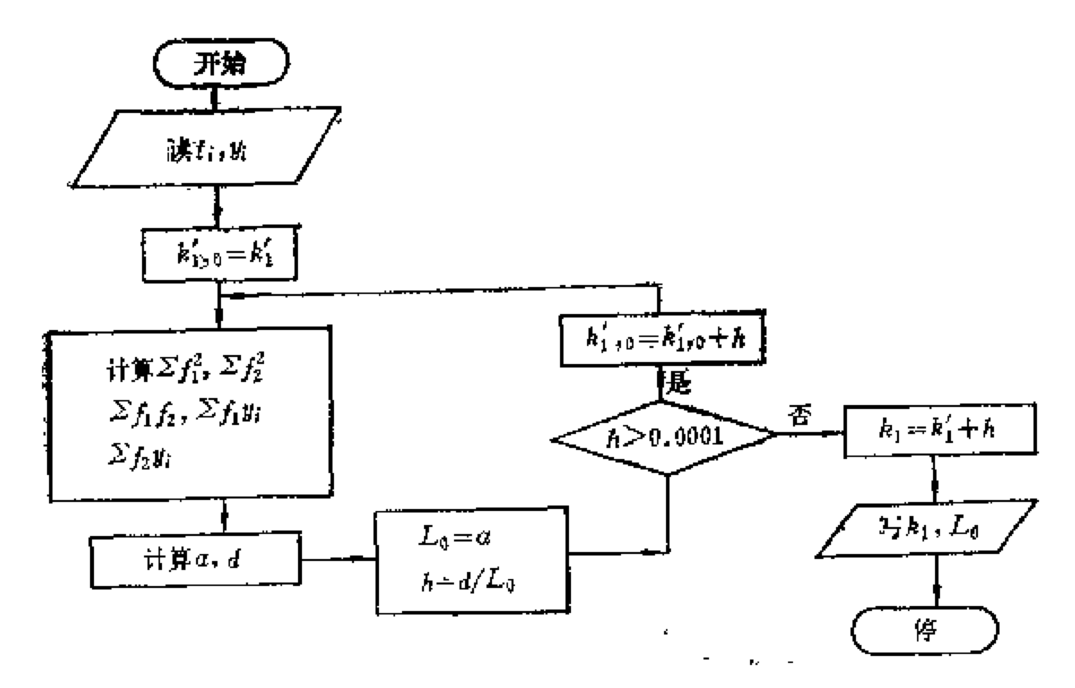


图3-8　k_1的计算框图

【例题3-6】

已知：

t_i(d)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i(mg/l)	58	85	107	125	138	147	155	161	167	170

求：k_1

解：　初设$k_1'=0.5\text{d}^{-1}$，用上述框图所编程序计算，

可求得$k_1=0.3165\text{d}^{-1}$

$L_0=175.48\text{mg/l}$

（2）斜率法

托马斯提出将需氧量与衰减时间的函数

$y(t)=L_0(1-e^{-k_1t})$ 关系按幂级数展开：

$$y(t)=L_0\left\{k_1t\left[1-\frac{k_1t}{2}+\frac{(k_1t)^2}{6}-\frac{(k_1t)^3}{24}+\cdots\right]\right\}$$

因 $$k_1t\left(1+\frac{k_1t}{6}\right)^{-3}=k_1t\left[1-\frac{k_1t}{2}+\frac{(k_1t)^2}{6}-\frac{(k_1t)^3}{21.6}+\cdots\right]$$

所以 $$y(t)\doteq L_0\left\{k_1t\left(1+\frac{k_1^{2/3}}{6L_0^{1/3}}\right)\right\}$$，则

$$\left[\frac{t}{y_t}\right]^{\frac{1}{3}}=(L_0k_1)^{-\frac{1}{3}}+\left(\frac{k_1^{2/3}}{6L_0^{1/3}}\right)t \qquad (3\cdot38)$$

可用图3–9所示的斜率图来表达上述关系。

$$a=(L_0k_1)^{-\frac{1}{3}}$$

$$d=\frac{k_1^{\frac{2}{3}}}{6L_0^{\frac{1}{3}}}$$

所以 $$k_1=6\frac{d}{a}$$

$$L_0=\frac{1}{k_1a^3} \qquad (3\cdot39)$$

图3-9 斜率法求k_1示意图

【例题3–7】

用上例的数据，以斜率法求k_1，L_0。

解：用t_i——y_i数据，可算出以下结果

t_i	1	2	3	4	5
$(t/y_i)^{\frac{1}{3}}$	0.258	0.287	0.304	0.318	0.331
t_i	6	7	8	9	10
$(t/y_i)^{\frac{1}{3}}$	0.344	0.356	0.368	0.378	0.389

将以上结果作图得图3-10，用图中的直线截矩与斜率，即可计算出：

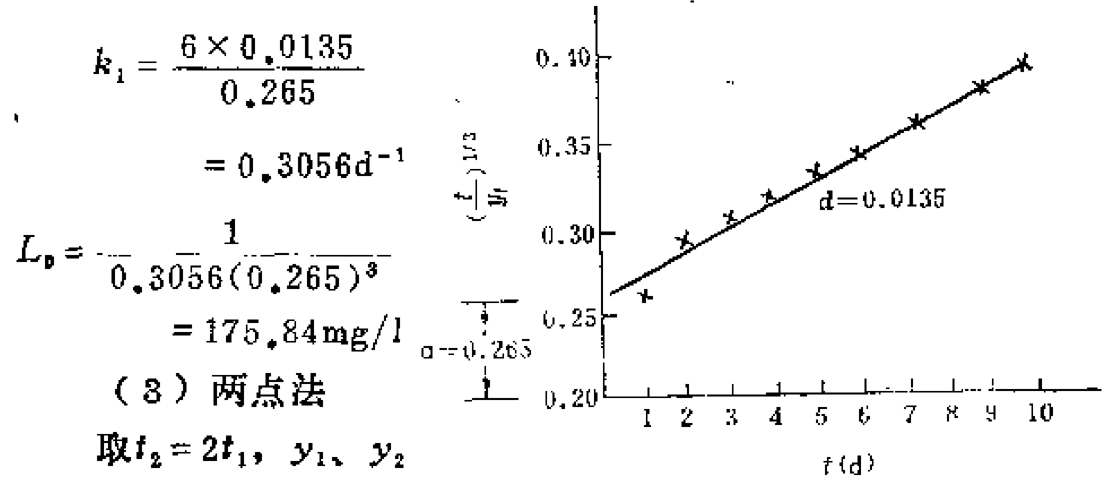


图3-10 斜率法求k_1

$$k_1=\frac{6\times0.0135}{0.265}$$

$$=0.3056\mathrm{d}^{-1}$$

$$L_0=\frac{1}{0.3056(0.265)^3}$$

$$=175.84\mathrm{mg/l}$$

（3）两点法

取$t_2=2t_1$，y_1、y_2为相应的需氧量。

因为　$y_1=L_0(1-e^{-k_1t_1})$，$y_2=L_0(1-e^{-2k_1t_1})$

所以

$$k_1=\frac{1}{t_1}\ln\frac{y_1}{y_2-y_1}$$

$$L_0=\frac{y_1^2}{2y_1-y_2} \tag{3·40}$$

方法虽简单，但误差可能较大。

【例题3-8】

取〔例3-6〕中t_3时，$y_3=107\mathrm{mg/l}$；t_6时，$y_6=147\mathrm{mg/l}$。用此两点可算得

$$k_1=\frac{1}{3}\ln\frac{107}{147-107}=0.3279\mathrm{d}^{-1}$$

$$L_0=\frac{(107)^2}{2\times107-147}=170.88\mathrm{mg/l}$$

（二）由河水实测数据计算k_1

1．内梅罗（Nemerrow）法——在已知k_2条件下，由斯特里特-费尔普斯氧平衡方程估算k_1

斯特里特-费尔普斯的氧平衡方程为

$$\frac{dD}{dt}=k_1L-k_2D \tag{3·41}$$

式中：D——河水DO亏浓度； L——河水BOD浓度；
k_1——耗氧系数； k_2——复氧系数。

临界DO亏处，$\mathrm{d}D/\mathrm{d}t=0$

所以

$$D_c=\frac{k_1}{k_2}L=\frac{k_1}{k_2}L_0e^{-k_1t_c} \tag{3·42}$$

式中：D_c——河水的临界DO亏浓度；
t_c——河水到达临界DO亏处的流动时间。

或写成

$$\ln D_c=\ln k_1+\ln\frac{L_0}{k_2}-k_1t_c \tag{3·43}$$

可用牛顿迭代试算法近似解出上式中的 k_1 值。迭代计算公式为

$$k_{1(n+1)}=k_{1(n)}-\frac{f(k_{1(n)})}{f'(k_{1(n)})}=k_{1(n)}-\frac{\frac{1}{t_c}\left(\ln k_{1(n)}+\ln\frac{L_0}{k_2D_c}\right)-k_{1(n)}}{\frac{1}{t_ck_{1(n)}}-1}$$

即

$$k_{1(n+1)}=k_{1(n)}-k_{1(n)}\frac{\left[\ln k_{1(n)}+\ln\left(\frac{L_0}{k_2D_c}\right)-t_ck_{1(n)}\right]}{1-t_c(k_{1(n)})} \tag{3·44}$$

【例题3-9】

已知：$L_0=15\mathrm{mg/l}$，$O_s=9.0\mathrm{mg/l}$，$k_2=2\mathrm{d}^{-1}$。
并由水团追踪试验（即跟踪水团流动到达的时间，采河段断面水样测定水质）得以下数据：

河水流经时间（d）	0	0.1	0.3	0.6	0.9	1.2	1.5	1.8	2.0
DO (mg/l)	7.5	6.48	5.3	4.84	5.13	6.32	6.33	6.89	7.22
DO亏 (mg/l)	1.5	2.52	3.7	4.16	3.87	2.68	2.67	2.11	1.78

求： k_1

解：由上述测定数据，可作得如图3-11的DO氧垂曲线，从而得到临界氧亏D_c值为4.2mg/l，临界流动时间 t_c为0.6d。将此值代入方程(3·43) 得 $\ln 4.2=\ln k_1+\ln 15-\ln 2-0.6k_1$

即 $0.6k_1-\ln k_1-0.58=0$

用牛顿迭代试算法解得

$k_1=1.054\mathrm{d}^{-1}$。

图3-11 DO垂曲线

2．在已知k_2条件下，由4个断面的河水溶解氧值估算k_1（克佛-菲利普 koivo-Phillip法）

克佛-菲利普根据

$$
\begin{cases}
\dfrac{dL}{dx}=-\dfrac{k_1}{u}L \\
\dfrac{dO}{dx}=-\dfrac{k_1}{u}L+\dfrac{k_2}{u}(O_s-O)+\dfrac{P-R}{u}
\end{cases}
$$

式中： P-R——水生植物产氧速率与底泥增加BOD的耗氧速率之差，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕。

在初值为L_0和O_0时推导得

$$
\begin{cases}
k_1=-\dfrac{u}{x}\ln\phi_{11} \\
P-R=\{S_t/[b_2(\phi_{11}-1)]\}-k_2O_s
\end{cases}
\tag{3·45}
$$

式中： $\phi_{11}=\dfrac{\phi_{22}[y(2)-y(1)]-y(3)+y(2)}{\phi_{22}[y(1)-y(0)]-y(2)+y(1)}$

$$\phi_{22}=e^{-k_2x/u}$$

$$b_2=\frac{1}{k_2}(1-\phi_{22})$$

$$S_t=\phi_{22}y(1)-y(2)-\phi_{11}[\phi_{22}y(0)-y(1)]$$

$y(0)$，$y(1)$，$y(2)$，$y(3)$——$x_1=0$，$x_2=1$，$x_3=2$，$x_4=3$各断面处测得的溶解氧值（$x_i-x_{i-1}=$常数）。

【例题3-10】

河段长6 km，每隔2 km（$x_i-x_{i-1}=2$）测得DO为$y(0)=6$，$y(1)=4.19$，$y(2)=5.47$，$y(3)=7.08$。$k_2=0.6\text{d}^{-1}$，$u=1\text{ km/d}$，$Os=8\text{ mg/l}$。
求k_1，$P-R$

解：
$$\phi_{22}=e^{-(0.6)(2)/(1)}=0.3$$

$$\phi_{11}=\frac{0.3(5.47-4.19)-7.08+5.47}{0.3(4.19-6)-5.47+4.19}=0.673$$

$$S_t=(0.3)(4.19)-5.47-6.73[(0.3)(6)-4.19)]$$
$$=-2.6$$

$$b_2=\frac{(1-0.3)}{0.6}=1.17$$

得：

$$\begin{cases}k_1=-\dfrac{1}{2}\ln 0.673=0.2\text{d}^{-1}\\ P-R=[(-2.6)/(1.17)(0.673-1)]-(0.6)(8)\\ \quad=2\text{mg/(l·d)}\end{cases}$$

3．两点法

$$k_1=\frac{u}{x}\ \ln\frac{L_1}{L_2} \qquad (3\text{·}46)$$

式中：L_1，L_2——河水始末两端的BOD_5，$[ML^{-3}]$

x，u——河段长度，$[L]$；平均流速，$[LT^{-1}]$

此法虽简单，误差可能较大。可多取几点求得k_1的平均值。

【例题3-11】

某河段在几个断面（t_i），测得河水的BOD_5值如表3-8。（参见图3-12）

$$\frac{L_{i+1}}{L_i}=e^{-k_1(t_{i+1}-t_i)}$$

$$(k_1)_i=\frac{1}{t_{i+1}-t_i}\ln\frac{L_i}{L_{i+1}}$$

$$=\frac{1}{\Delta t_i}\ln\frac{L_i}{L_{i+1}}$$

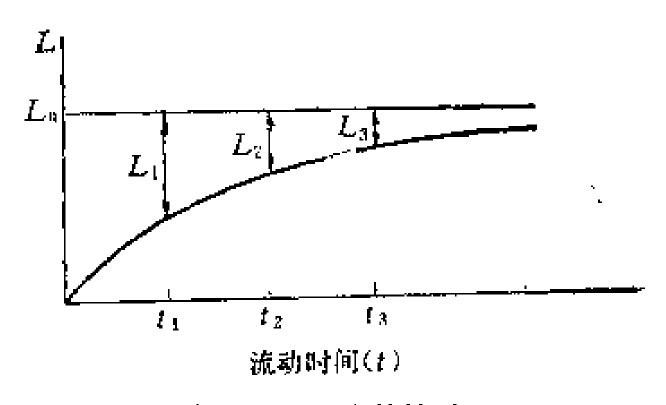


图3-12 河段特性图

$$\overline{k_1}=\frac{\sum_1^n(k_1)_i}{n} \tag{3·47}$$

$$或\overline{k_1}=\frac{\sum(|t_i-\bar{t}|)\ln\frac{L_i}{\bar{L}}}{\sum(t_i-\bar{t})^2} \tag{3·48}$$

式中：$\bar{t}=\frac{\sum t}{n}$，$\bar{L}=\frac{\sum L_i}{n}$。

表3-8 两点法计算$\bar{k}_1$

t_i	0	1.33	2.30	3.02	3.92	4.64
Δt_i	1.33	0.97	0.92	0.90	0.72	
L_i	9.28	7.35	6.50	5.75	5.17	4.45
$\bar{t}$	2.54					
$\bar{L}$	6.42					
$(k_1)_i$	0.175	0.127	0.17	0.118	0.208	
$\bar{k}_1$	0.16					

若用公式（3·48）计算，得

$$\overline{k_1} = \frac{(\sum |t_i - \bar{t}|)\ln \dfrac{L_i}{\bar{L}}}{\sum (t_i - \bar{t})^2} = \frac{2.25}{14.51} = 0.16$$

（三）用NBOD一级反应式来估k_N

硝化过程的一级反应式为

$$\frac{dL_N}{dt} = -k_N L_N \tag{3·49}$$

其积分式为

$$L_N = L_{N(0)} e^{-k_N t} \tag{3·50}$$

或 $$\ln L_N = \ln L_{N(0)} - k_N t \tag{3·51}$$

式中：$L_{N(0)}$——河流起始断面（$t=0$）处NBOD的浓度，〔ML^{-3}〕；

L_N——河流下流断面（$t=t$）处NBOD的浓度，〔ML^{-3}〕；

k_N——NBOD的衰减速率系数，〔T^{-1}〕。

采用（3·50）或（3·51）式，可以根据河流不同断面处的CBOD实测数据来估算k_N值，估值方法可用两点法、作图法或最小二乘法等。

【例题3-12】 已测得河流各断面的NH_4^+-N和NO_3^--N与

表3-9 河流不同流经时间下的NH_4^+-N、NO_3^--N与NO_2^--N浓度

流经时间 (d)	NH_4^+-N (mg/l)	NO_3^--N + NO_2^--N (mg/l)	NO_3^--N + NO_2^--N 的增量(mg/l)	扣除被氧化的NH_4^+-N(mg/l)
0	9.6	2.5	0	9.6
0.3	8.8	3.0	0.5	9.1
0.6	8.1	3.4	0.4	8.7
0.8	7.6	3.7	0.3	8.4
1.0	7.0	4.2	0.5	7.9
1.5	5.0	4.9	0.7	7.2
2.0	3.0	5.7	0.8	6.4
2.5	2.2	6.3	0.6	5.8

NO_2^-－N的浓度（见表3-9中1、2、3列）。求硝化反应的衰减系数k_N。

解：

（1）由两点法可求得

$$k_N = \frac{\ln 9.6 - \ln 5.8}{2.5} = 0.202 \quad d^{-1}$$

（2）逐个计算k_{Ni}（两点法），再求$\bar{k}_N$

$k_{N1}=0.178$，　$k_{N2}=0.149$，　$k_{N3}=0.175$

$k_{N4}=0.307$，　$k_{N5}=0.186$，　$k_{N6}=0.236$

$k_{N7}=0.197$

所以 $\bar{k}_N = \frac{\sum k_{Ni}}{7} = 0.204 \quad d^{-1}$

（3）由作图法求k_N

以$\ln[NH_4^+]$为纵坐标，时间为横坐标，作图（图3-13），可求得直线斜率

$k_N = 0.205 d^{-1}$。

由此可见，用几种不同的方法估算的k_N值都很一致，其相对误差不大于2%。

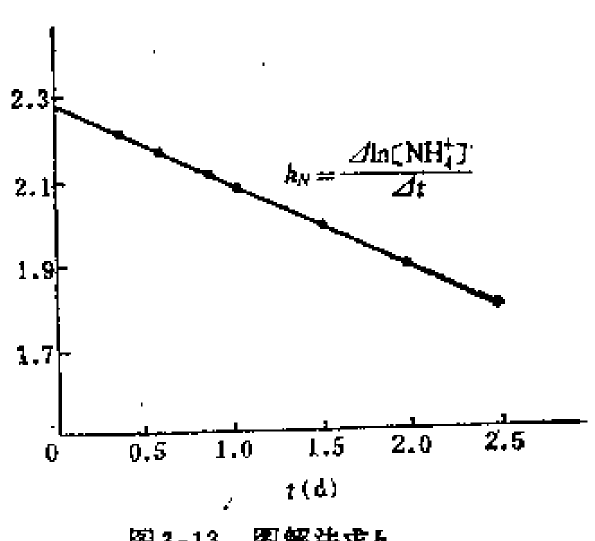


图3-13　图解法求k_N

四　复氧系数k_2的估值

（一）实测法估算k_2

1．测定夜间河流断面的DO变化

霍恩贝格（Hormberger）根据夜间无光合作用和藻类呼吸速度的条件，采用

$$\frac{dO}{dt} = k_2(O_s - O) - R_0 \qquad (3\cdot52)$$

式中： R_0—— 藻类呼吸耗氧系数，mg/(l·d)

在$t_i \longrightarrow t_{i+1}$边界条件下（$t_{i+1}-t_i=\delta$）积分得

$$O_{i+1}-O_i=\left[(\overline{O}_{si}-O_i)-\frac{R_0}{k_2}\right](1-e^{-k_2\delta}) \quad (3·53)$$

式中： O_{si}—— 在δ时间内河水中溶解氧的饱和浓度的平均值，mg/l。

方程（3·53）可写为

$$d_i=a_i\xi_1-\xi_2\xi_1 \quad (3·54)$$

式中： $d_i=O_{i+1}-O_i$;

$a_i=\overline{O}_{si}-O_i$;

$\xi_1=1-e^{-k_2\delta}$;

$\xi=R_0/k_2$。

由最小二乘法原理可求得：

$$\xi_2=\frac{-(\Sigma a_i^2\Sigma d_i-\Sigma a_i d_i\Sigma a_i)}{n\Sigma a_i d-\Sigma a_i\Sigma d_i} \quad (3·55)$$

$$\xi_1=\frac{\Sigma d_i}{\Sigma a_i-n\xi_2} \quad (3·56)$$

式中： n——测量时间间隔数。

所以 $$k_2=-\frac{1}{\delta}\ln(1-\xi_1) \quad (3·57)$$

$$R_0=k_2\xi_2$$

【例题3-13】

某河夜间每隔4 h（$\delta=4$）取样测DO一次（$n=3$）。得以下数据和计算结果（见表3-10）。求：k_2和R_0

$$\xi_2=\frac{-[(3.5269)(-0.72)-(0.7639)(3.19)]}{(3)(-0.7639)-(3.19)(-0.72)}=20.1176$$

$$\xi_1=\frac{-0.72}{(3.19)-(3)(20.1176)}=0.01260$$

表3-10　由夜间实测河流断面DO变化，计算K_2的有关参数表

t_i 点:分	O_i (mg/l)	$\bar{O}_{si}$ (mg/l)	$a_i=\bar{O}_{si}-O_i$ (mg/l)	a_i^2 (mg/l)^2	$d_i=O_{i+1}-O_i$ (mg/l)	a_id_i (mg/l)^2
18:00	8.04	8.82	0.78	0.6084	-0.29	-0.2262
22:00	7.75	8.87	1.12	1.2544	-0.10	-0.1120
2:00	7.65	8.94	1.29	1.6641	-0.33	-0.4257
6:00	7.32					
		Σ	3.19	3.5269	-0.72	-0.7639

所以
$$\begin{cases} k_2=-\dfrac{1}{4}\ln(1-0.0126)=0.317\mathrm{d}^{-1} \\ R_0=(0.0317)(20.1176)=0.6377\mathrm{mg/(l\cdot d)} \end{cases}$$

2．测定无藻类作用河流断面DO的变化，粗估k_2。

邱吉尔（Churchill）等人提出按下式表达溶解氧亏的变化

$$\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}t}=-k_2D \tag{3·58}$$

式中：　D——河水溶解氧亏浓度，mg/l。

方程3.58积分得

$$k_2=\frac{\ln D_2-\ln D_1}{t_1-t_2} \tag{3·59}$$

式中：　t_1，t_2——为取样测定的两个时间，〔T〕；

D_1，D_2——t_1和t_2时的溶解氧亏浓度，〔ML^{-3}〕。

【例题3-14】

某河流断面11：00点，测得$O_1=8.04$mg/l（水温为21.5℃）；15：00点测得$O_2=7.75$mg/l（水温为21.2℃）。求k_2

溶解氧亏　$D_1=\dfrac{468}{31.6+21.5}-8.04=8.8136-8.04=0.7736$

$$D_2=\frac{468}{31.6+21.2}-7.75=8.8636-7.75=1.1136$$

所以 $$k_2=\frac{\ln1.1136-\ln0.7736}{4}=\frac{0.1076+0.2567}{4}$$

$$=0.1284\text{d}^{-1}$$

3．在已知k_1条件下，由斯特里特-费尔普斯氧平衡方程估算k_2

（1）采用方程：

$$D_c=\frac{k_1}{k_2}L_0e^{-k_1t_c} \qquad (3\cdot60)$$

或 $$k_2=k_1\frac{L_0}{D_c}(e^{-k_1t_c}) \qquad (3\cdot61)$$

式中：k_1——BOD衰减系数，〔T^{-1}〕；

L_0——河水始端BOD_5浓度，〔ML^{-3}〕；

Dc——临界氧亏浓度，〔ML^{-3}〕；

t_c——河水流至临界氧亏处的流动时间，〔T〕。

【例题3-15】

已知$L_0=15\text{mg/l}$，$k_1=0.985\text{d}^{-1}$，由溶解氧氧垂曲线得知$t_c=0.6\text{d}$，$D_c=4.6\text{mg/l}$（$O_s=9.0\text{mg/l}$）。

求 k_2

解 $$k_2=(0.985)\frac{(15)}{(4.6)}(e^{-0.985\times0.6})$$

$$=1.779\text{d}^{-1}$$

（2）采用方程

$$k_2=k_1\frac{\overline{L}}{\overline{D}}-\frac{\Delta D}{2.3\Delta t\overline{D}} \qquad (3\cdot62)$$

式中：$\overline{L}$——在河段上下断面间平均BOD浓度，〔ML^{-3}〕；

$\overline{D}$——在河段上下断面间平均溶解氧亏，〔ML^{-3}〕；

ΔD——上游到下游断面的氧亏变化，〔ML^{-3}〕；

Δt——流经时间时隔，〔T〕；

k_1——耗氧系数，〔T^{-1}〕。

【例题3-16】

已知某河段始端河水的 $L_1 = 31mg/l$， $D_1 = 6.8mg/l$，$k_1 = 0.43d^{-1}$，流经时间 $t = 0.2d$ 到达末端时河水的 $L_2 = 28.5 mg/l$，$D_2 = 7.2mg/l$。求k_1。

解：

$$\overline{L} = \frac{31 + 28.5}{2} = 29.75,\ \overline{D} = \frac{6.8 + 7.2}{2} = 7$$

$$\Delta D = 7.2 - 6.8 = 0.4$$

所以 $$k_2 = \frac{(0.43)(29.75)}{(7)} - \frac{(0.4)}{(2.3)(0.2)(7)}$$

$$= 1.828 - 0.124 = 1.704\ d^{-1}$$

（二）经验公式估k_2

1．奥康纳-多宾斯（O'Connor-Dobbins）公式使用得最普遍。

$$k_{2(20℃)} = \frac{[D_{M(20℃)}\,u]^{0.5}}{h^{1.5}} \tag{3.63}$$

或 $$k_{2(20℃)} = \frac{294[D_{M(20℃)}u]^{0.5}}{h^{1.5}}\ d^{-1} \tag{3·64}$$

式中：$D_{m(20℃)}$——20℃时氧分子在水中的扩散系数，$1.76 \times 10^{-4} m^2/d$；

u——平均流速，m/s；

h——平均水深，m。

或 $$k_{2(20℃)} = \frac{[D_{M(20℃)}u]^{0.5}}{h^{1.5}} \times 86400\ d^{-1} \tag{3·65}$$

式中：$D_{m(20℃)}$——$2.037 \times 10^{-9} m^2/s$；

u——平均流速，m/s；

h——平均水深，m。

或
$$k_{2(20℃)}=\frac{3.89u^{0.5}}{h^{1.5}}\quad d^{-1} \tag{3·66}$$

式中：u——平均流速，m/s；

h——平均水深，m。

任意温度（T℃时）与20℃水温时的复氧系数 k_2 有以下的关系

$$k_{2(T℃)}=k_{2(20℃)}\cdot(1.024)^{T-20} \tag{3·67}$$

式中：T——为任意温度，℃

1.024——为温度系数。

2．村上公式

$$k_{2(20℃)}=\frac{22.56n^{3/4}u^{9/8}}{h^{3/2}} \tag{3·68}$$

式中：n——粗糙系数；

u——平均流速，m/s；

h——平均水深，m。

采用村上公式要求有粗糙系数的资料。

五　河床底泥耗氧速率L_a的估值

河床底泥有机物的耗氧速率L_a，可以从实验测定值求得。

（一）河床底泥耗氧的实验装置与测定方法

英国水质污染研究所与日本杉木昭典用如图3-14所示实验装置测定每小时单位面积污泥的耗氧速率 k_W〔g(O_2)/(m^2·h)〕。

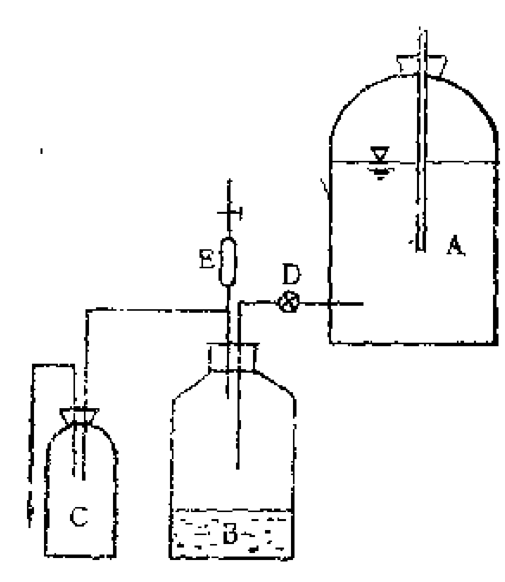


图3-14　实验装置

A—曝气蒸馏水瓶　B—底泥试样瓶
C—出水收集瓶　D—流量调节阀
E—抽升器

实验方法：

在瓶B中装入6—7cm厚的污泥，用曝气蒸馏水灌满瓶B，在20℃的恒温室内静置约一昼夜，然后连续供给曝气蒸馏水，以流出水的溶解氧与20℃水的饱和溶解氧浓度的差值作为测定的消耗氧量。

（二）河床底泥的耗氧速率

$$\frac{dL}{dt}=La=k_W/h \tag{3·69}$$

式中：L——河床底泥厌气分解所引起河水BOD浓度的增加测，〔ML^{-3}〕；

La——底泥分解所引起河水BOD增加的速度，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

k_W——实验室测得的底泥单位时间内单位面积耗氧速率，〔$ML^{-2}T^{-1}$〕；

h——平均水深，〔L〕。

第二节　河流（口）水质模型的多参数同时估值法

应用多维参数的最优化估值法，可以同时确定模型中的各个参数。这种方法的优点是从模型的整体出发求得参数值，使水质模型的可靠性提高。但需要注意的是这种非线性的多维参数最优搜索过程中，由于多变量函数的非凸特性，会因所取初始值的不同，求得的“最优值”将有所不同，此时所求得的解实际是局部最优解，而非整体最优解。为了避免这种问题，除了要对可行范围内的各种初始值的“优值”多做些比较外，有时往往采用降维的方法降低待估参数的维数，再进行最优搜索。

对多变量函数往往采用直接最优化方法搜索其最优值。也就是从给定的初始值（或起点）k_{io}出发，每次增减一定的量，逐

步改善目标函数$J(\vec{k_i})$，直到其满足目标值收敛的误差要求。目前直接最优化方法大多采用一阶梯度法（又称“最速下降法”），即在原点（或起点）的目标函数值$J(\vec{k_i})$下降速率最快的方向$-\partial J(\vec{k})/\partial k$（一阶负梯度的方向），按一定的步长进行搜索。每次改进目标函数值，并得到新的起点。如此反复迭代计算，直到满足要求。

水质模型参数的同时估值法的工作步骤

1）收集一定排污条件下河流各断面BOD_5和DO的实测离散分布序列集合，$\left\{b_{ij}^m\right\}$和$\left\{c_{ij}^m\right\}$。m表示实测值，i表示第i次测量（$i=1,\cdots,n$），j表示第j断面（$j=1,\cdots,r$）。

2）用选定的河流水质模型，在同样的排污条件下，计算BOD_5和DO的计算序列集合，

$$\{b_{ij}\} \text{ 和 } \{c_{ij}\} \text{。}$$

3）由实测序列值和模型计算序列值之差的某一范数（常用=范数）构成一目标函数。

$$\text{对BOD } J_b=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}(b_{ij}-b_{ij}^m)^2=J_b(k_h) \qquad (3\cdot70)$$

$$\text{对DO } J_c=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}(C_{ij}-C_{ij}^m)^2=J_c(k_h) \qquad (3\cdot71)$$

对第i次的总目标函数：

$$J^i=\sum_{j=1}^{n}[\lambda J_b^i+(1-\lambda)J_c^i]^2=J^i(k_h^i) \qquad (3\cdot72)$$

式中：λ——加权因素，（$0\leqslant\lambda\leqslant1$）。表示BOD和DO实测值的相对可靠性或重要性，当$\lambda=0$时，指BOD值不可靠；当$\lambda=1$时，指DO值不可靠；当$\lambda=0.5$时，指BOD和DO值同等可靠；

k_h——待估参数，（$h=1,\cdots,l$）。

4）在有约束条件下，用一阶梯度法，搜索目标函数值最

小时的待估参数（或“决策变量”）序列 $\{k_h^*\}$ 。

即
$$J^i \xrightarrow[\{k_h^i\}=\{k_h^i\}^*]{} (J^i)_{\min} \tag{3·73}$$
（约束 $a_h \leqslant k_h \leqslant d_h$）

由于上述非线性目标函数最优值的梯度搜索法，不能保证获得全局的最优解，往往引起较大的误差。对此作者开发了一种新的“计算机扫描计算-图解-梯度搜索法”可以可靠地获得计算值与实测值之间误差平方和整体最小。

一 “梯度搜索法”求解河流水质模型的最优参数值

（一）斯特里特-费尔普斯（Streeter-Phelps）BOD-DO 模型参数的估值S-P模型为

$$\begin{cases} b = b_o\, e^{-k_1 x/u} \\ c = c_s - (c_s - c_o)\, e^{-k_2 x/u} + \dfrac{k_1 b_0}{k_1 - k_2}\left(e^{-k_1 x/u} - e^{-k_2 x/u}\right) \end{cases} \tag{3·74}$$

式中： b——BOD浓度；　　C——COD浓度；

其它符号同前。

目标函数用：

$$J(k_1、k_2) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}\left[c(k_1, k_2, c_s, c_o, b_o, t_{ij}) - c_{ij}^m\right]^2$$

式中： t_{ij}——第 i 次监测的第 j 断面河水流经时间，〔T〕。

采用一阶梯度搜索最优解

$$J = \sum_{j=1}^{r}\left[c - c_j^m\right]^2 \xrightarrow[\{k_1, k_2\} = \{k_1^*, k_2^*\}]{} J\min \tag{3·75}$$

最优搜索计算程序可以有两种（如图3-15，3-16）。计算框图(Ⅱ)，采用了改进的梯度法，比框图(Ⅰ)节省计算机机时（在PC-1500袖珍机上约节省三倍机时）。

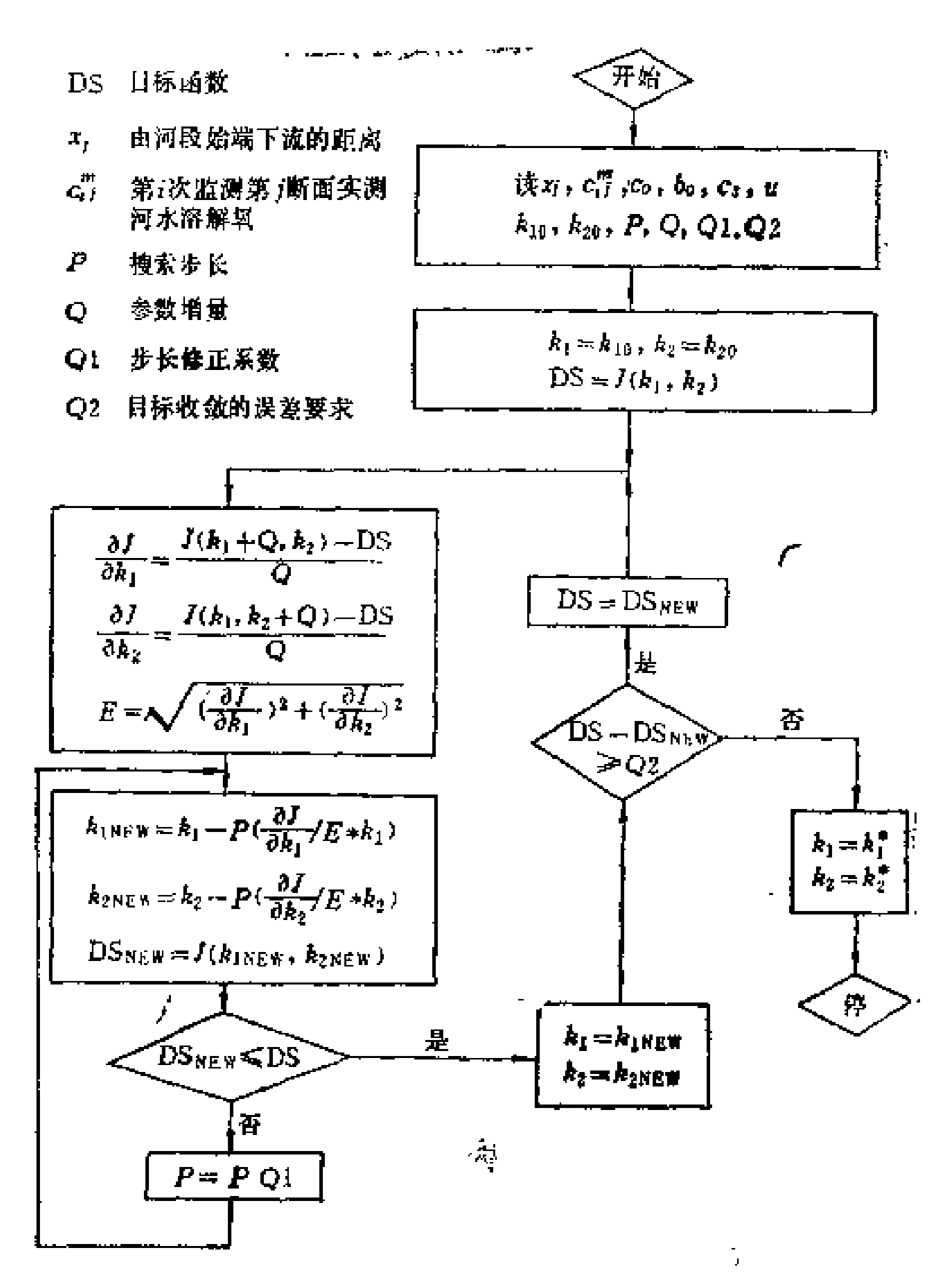


图3-15 S-P模型参数的最优搜索计算框图(I)

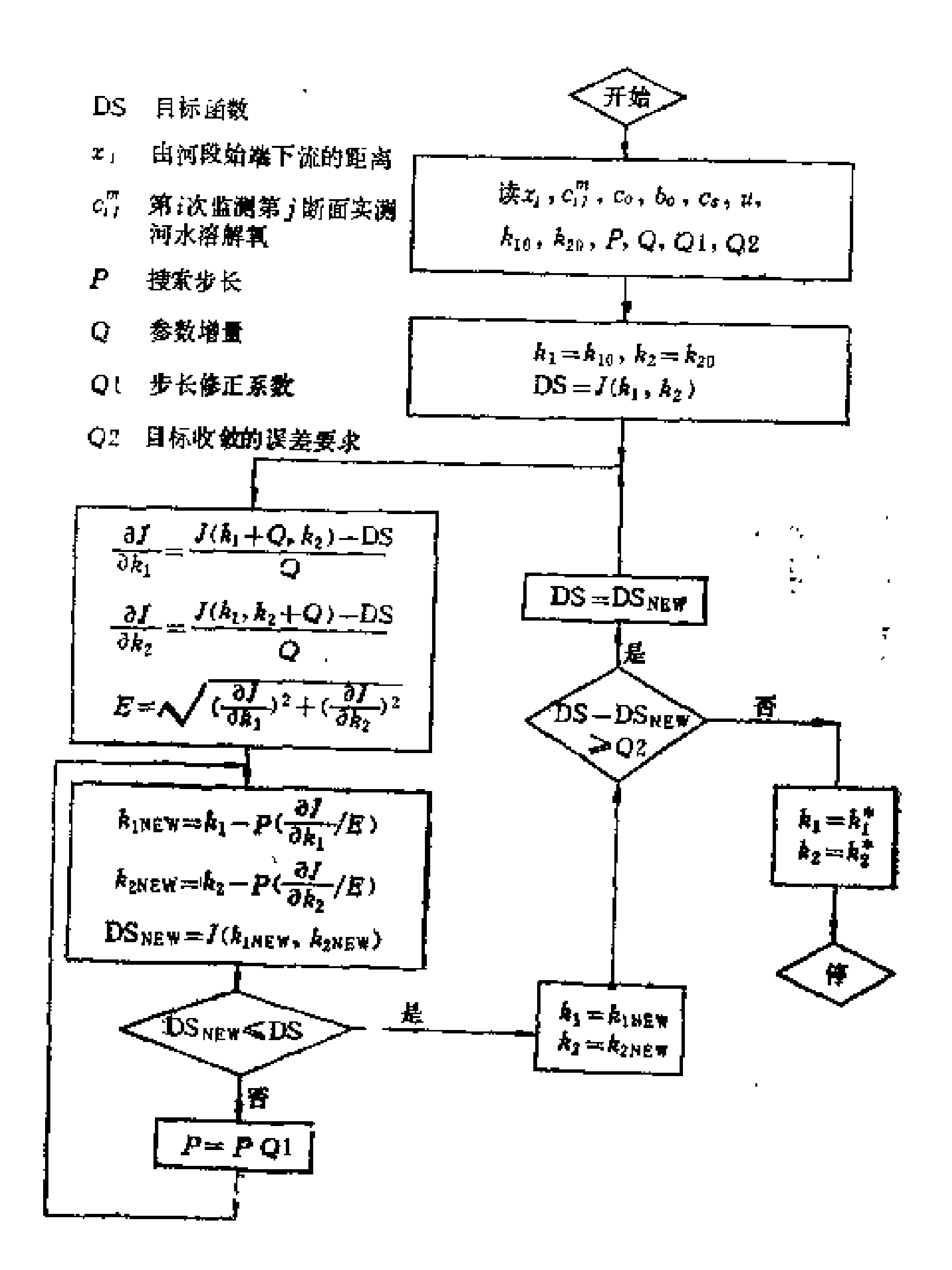


图3-16 S-P模型参数的最优搜索计算框图(II)——改进梯度法

【例题3-17】

已知：某河段起始断面$b_0=20mg/l$，$c_0=10mg/l$及各断面实测数据（表3-11）。

表3-11 各断面实测数据

断面号	1	2	3	4
断面距离(km)	8	28	36	56
平均流速(km/h)	4			
t_j (h)	2	7	9	14
c_j^m (mg/l)	8.5	7.0	6.1	7.2
c_s (mg/l)	10			

求：k_1和k_2

解：

$$DS=J(k_1,k_2)=\left[10+\frac{20k_1}{k_1-k_2}(e^{-2k_1}-e^{-2k_2})-8.5\right]^2$$

$$+\left[10+\frac{20k_1}{k_1-k_2}(e^{-7k_1}-e^{-7k_2})-7.0\right]^2$$

$$+\left[10+\frac{20k_1}{k_1-k_2}(e^{-9k_1}-e^{-9k_2})-6.1\right]^2$$

$$+\left[10+\frac{20k_1}{k_1-k_2}(e^{-14k_1}-e^{-14k_2})-7.2\right]^2$$

当取$P=0.5$，$Q=0.001$，$Q_1=0.25$，$Q_2=0.0001$，$k_{10}=0.5$，$k_{20}=0.9$时，用程序计算得

$$k_1=0.0537h^{-1}$$

$$k_2=0.1981h^{-1}$$

$$J_{min}=0.469$$

循环次数$M=33$

当取$P=0.5$，$Q=0.001$，$Q_1=0.25$，$Q_2=0.0001$，$k_{10}=0.01$，$k_{20}=0.05$时，用程序计算得

$k_1 = 0.0499\text{h}^{-1}$

$k_2 = 0.184\text{h}^{-1}$

$J_{min} = 0.484$

循环次数　$M = 115$。

说明该程序在不同初始值时，所得结果基本相同，但有一定偏差。

（二）托马斯模型参数的同时估值

托马斯模型为

$$b = b_0 \exp\left[-\frac{(k_1 + k_3)x}{u}\right]$$

$$c = c_s - (c_s - c_0)\exp\left[-\frac{k_2 x}{u}\right] + \frac{k_1 b_0}{k_1 + k_3 - k_2} \times \left[\exp\left(-\frac{k_1 + k_3}{u}x\right) - \exp\left(-\frac{k_2 x}{u}\right)\right] \tag{3·76}$$

式中：b，b_0——$x = x$和$x = 0$处河水的BOD_5浓度，〔ML^{-3}〕；

c，c_0——$x = x$和$x = 0$处河水的溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

c_s——在T℃时河水的饱和溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

x——由始端$x = 0$起河水的流动距离，〔L〕；

u——河水平均流速，〔LT^{-1}〕；

k_1——BOD衰减系数，〔T^{-1}〕；

k_2——复氧系数，〔T^{-1}〕；

k_3——BOD沉浮系数，〔T^{-1}〕。

如以溶解氧的模型计算值与实测值之差的平方和作为目标函数，

即

$$DS = J(k_1, k_2, k_3) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}\left(c_{ij} - c_{ij}^{m}\right)^2 \tag{3·77}$$

式中：　DS——目标函数；

c_{ij}——由模型计算的第i次监测第j个断面的河水溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

c_{ij}^{m}——实测得到的第i次监测第j断面的河水溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕。

用一阶梯度法搜索目标函数值最小时的参数值

$$J=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}\left(c_{ij}-c_{ij}^{m}\right)^{2}\xrightarrow[\{k_1,k_2,k_3\}=\{k_1^*,k_2^*,k_3^*\}]{}\min \tag{3·78}$$

及

$$J_i=\sum_{j=1}^{r}\left(c_{ij}-c_{ij}^{m}\right)^{2}\xrightarrow[\{k_1,k_2,k_3\}=\{k_1^*,k_2^*,k_3^*\}]{}\min \tag{3·79}$$

式中：i——第i次（$i=1$，…，n）；

j——第j断面（$j=1$，…，r）；

J_i——第i次的目标值；

J——总的目标值。

托马斯模型k_1、k_2、k_3估值的最优搜索框图如图3-17。

【例题3-18】

某河各断面测得的溶解氧和起始断面的BOD_5浓度如表3-12。已知　$c_s=9.2mg/l$，$u=4\ km/h$。

表3-12　各断面溶解氧和BOD浓度

断　面　号	0	1	2	3	4	5
流动距离x_i(km)	0	4	8	16	32	40
溶解氧 c_i^m (mg/l)	8.43	6	4.5	3.3	3.9	4.7
BOD_5　(mg/l)	12					

求：参数k_1、k_2、k_3。

解：用图3-17框图所编程序进行最优解的搜索。

当搜索步长$P=0.5$，参数增量$Q=0.001$，步长修正系数$Q1=0.5$，目标收敛误差要求$Q2=0.00001$的条件下，采用不同的初始值k_{10}、k_{20}和k_{30}，所得结果并不都相同。（见表3-13）其差别的原因在于目标函数并非是单峰的凸函数，而是多峰的函数，

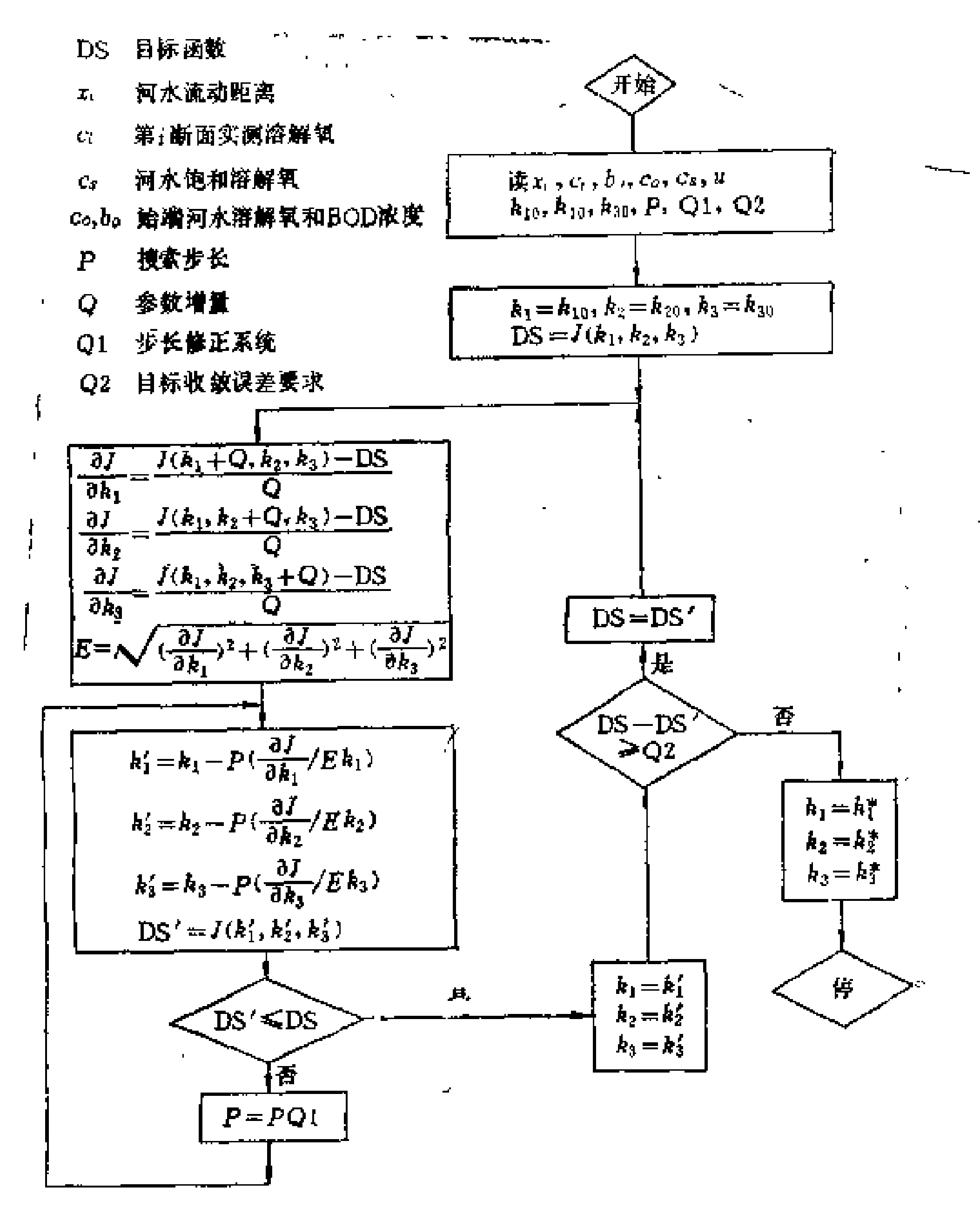


图3-17 托马斯模型参数（k_1、k_2、k_3）的最优搜索计算框图

因此在不同的初始值区间可能得到某一峰值的极小点（是局部最优解）而不是整个范围内的最小点（整体最优解）。

为此，可采用多种区间（多组的初始值）进行最优搜索的比较选择法来确定。选择的依据主要是目标函数值 J 最小。同时也要考虑参数值区间的合理范围。试验结果的典型情况汇总于表3-13内。

表3-13 不同初始值(k_{10}, k_{20}, k_{30})所搜索到的k_1^*, k_2^*, k_3^*

数据与结果		试验组数 1	2	3	4	5
输入数据与初始值	Q	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
	P	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
	Q_1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
	Q_2	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001	0.00001
	Q_3	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2
	k_{10}	2	0.5	0.2	0.06	0.005
	k_{20}	2	0.5	0.2	0.06	0.005
	k_{30}	0.1	0.1	0.05	0.02	0.005
输出结果	k_1^*	0.25778	0.25896	0.25716	0.256065	0.25779
	k_2^*	0.11677	0.11536	0.12470	0.125982	0.11774
	k_3^*	0.050397	0.053206	0.035661	0.033265	0.048217
	J	0.001614	0.0013501	*0.0013184	0.0017803	0.0015141
	P	0.007812	2.33×10^{-10}	9.31×10^{-10}	6.104×10^{-8}	2.33×10^{-10}
	M	32	55	47	45	97

表3-13说明k_{10}和k_{20}在整个区间变化时（2—0.005）搜索结果基本符合。而k_{30}的变化影响显著。当k_{30}在0.1—0.005范围内变化时，搜索结果，目标函数值皆很小$J=0.00132$—0.00178，参数值k_1^*、k_2^*、k_3^*比较一致。当$0.1<k_3<0$时，搜索结果的目标值将大大增加$J>0.009$，参数值k_1^*、k_2^*、k_3^*的波动也很大。从①—⑤组可行初始值区间的结果相比而言，以第③组最佳。故选用以下结果：

$k_1^* = 0.257\text{h}^{-1}$　　　　$J = 0.001318$

$k_2^* = 0.125\text{h}^{-1}$　　　　$P = 9.3\times10^{-10}$

$k_3^* = 0.036\text{h}^{-1}$　　　　$M = 47$（循环次数）

（三）奥康纳（O'Connor）模型参数的同时估值

奥康纳模型（$k_3 = 0$时）为

$$O = O_s - (O_s - O_0)e^{-k_2x/u} + \frac{k_1L_0(c)}{k_1 - k_2}\left(e^{-k_1x/u} - e^{-k_2x/u}\right)$$

$$+ \frac{k_NL_0(N)}{k_N - k_2}\left(e^{-k_Nx/u} - e^{-k_2x/u}\right) \quad (3\cdot80)$$

或写成　$$c = \left(c_0 - \frac{k_1b_0(c)}{k_1 - k_2} - \frac{k_Nb_0(N)}{k_N - k_2} - c_s\right)\exp\left(-\frac{k_2}{u}x\right)$$

$$+\left(\frac{k_1b_0(c)}{k_1 - k_2}\right)\exp\left(-\frac{k_1}{u}x\right) + \left(\frac{k_Nb_0(N)}{k_N - k_2}\right)\cdot$$

$$\exp\left(-\frac{k_N}{u}x\right) + c_s \quad (3\cdot81)$$

目标函数取溶解氧的模型计算值与实测值之差的平方和

$$DS = J(k_1, k_N, k_2) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}\left[c_{ij} - c_{ij}^m\right]^2$$

用一阶梯度法搜索其最优解：

$$J = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{r}\left[c_{ij}\ c_{ij}^m\right]^2 \xrightarrow[\{k_1,k_N,k_2\} = \{k_1^*,k_N^*,k_2^*\}]{} \min$$

奥康纳模型参数估值的最优搜索计算框图如图3-18。它可编制成三维变量最优搜索程序。

【例题3-19】

某河各断面处的溶解氧c_i^m实测资料及起始断面$CBOD_5$和NH_3-N的浓度如表3-14。已知：$c_s = 10.0\text{mg/l}$，$u = 4\text{km/h}$。

求：参数k_1、k_N、k_2

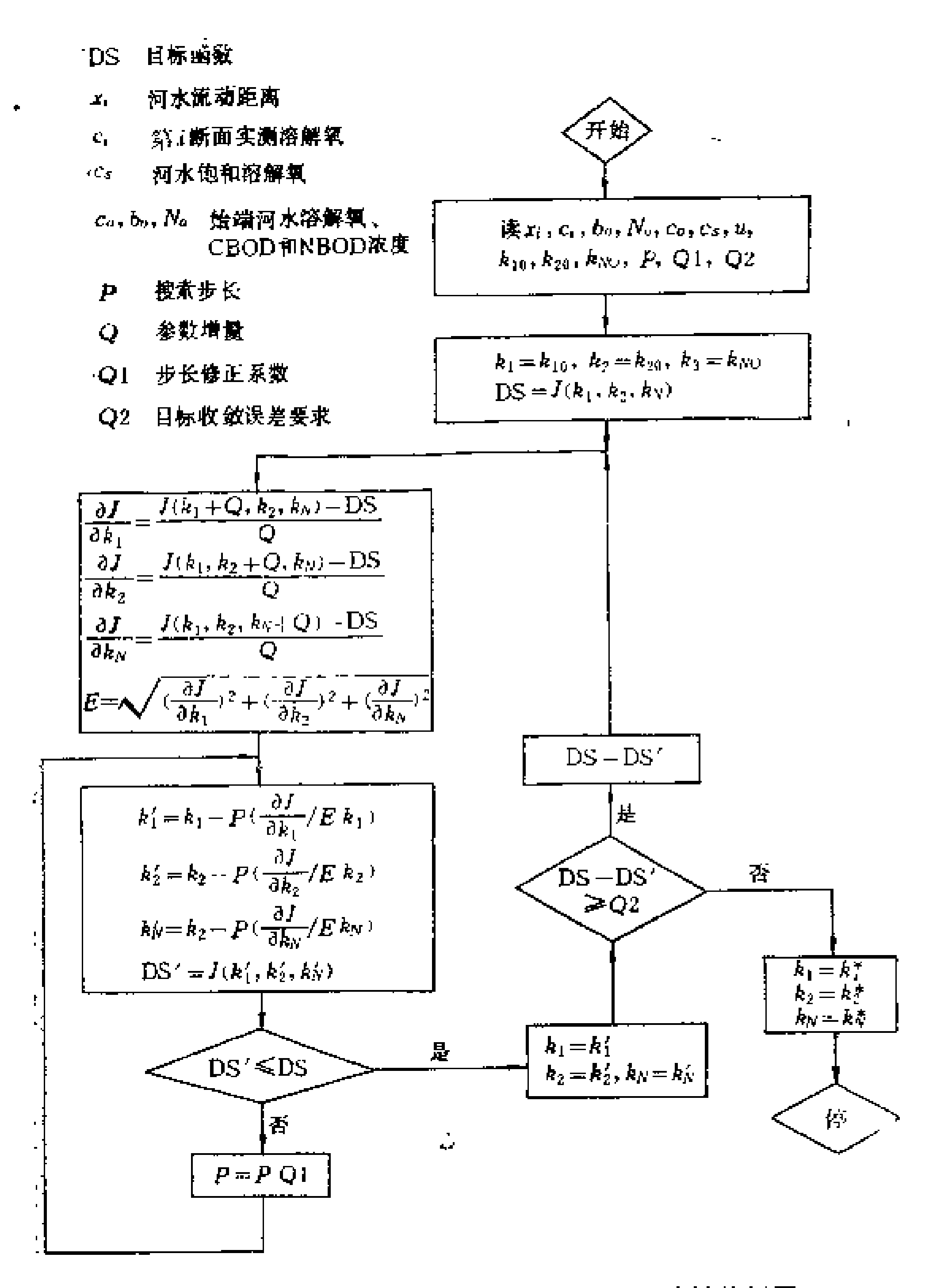


图3-18 奥康纳模型参数(k_1, k_2, k_N)的最优搜索计算框图

表3-14 某 河 实 测 资 料

断　面　号	0	1	2	3	4	5
流动距离x (km)	0	8	15	28	36	56
溶解氧 c_i^m (mg/l)	10	8.5	7.8	7.0	6.1	7.2
$CBOD_5$ (mg/l)，b_0^m	15					
NH_3-N (mg/l) N_0^m	0.5					

解：用所编程序进行最优搜索

当搜索步长$P=0.5$，参数增量$Q=0.001$，步长修正系数$Q1=0.5$，目标收敛允许误差$Q2=0.00001$时，$k_{10}=0.01—0.6$、$k_2=0.02—0.5$、$k_{N0}=0.005—0.4$的整个区间内进行了搜索比较。其结果见表3-15。

当k_{10}、k_{20}、k_{N0}在整个区间变化时，搜索得到的k_1和k_2基本相同（$k_1=0.064—0.056$，$k_2=0.158—0.149$）；而k_N则变化较大（$k_N=0.0048—0.36$）。但由于$k_{10}=0.06—0.6$、$k_{20}=0.2——0.5$、$k_{N0}=0.04—0.4$或更大的值，不符合一般的速率系数值的范围，而且搜索结果也证明目标函数将增大。在$k_{10}=0.01—0.06$、$k_{20}=0.02—0.2$、$k_{N0}=0.01$这一组目标函数$J=0.50659$是最小值。

故搜索结果采用

$k_1^*=0.0640h^{-1}$　　　　$J=0.5066$

$k_2^*=0.158h^{-1}$　　　　$P=3.7\times10^{-9}$

$k_N^*=0.0102h^{-1}$　　　　$M=13$（循环次数）

表3-15 不同初始值(k_{10}，k_{20}，k_{N_0})所搜索到的k_1^*，k_2^*，k_N^*

输入数据	与结果	试验组数 1	2	3	4	5	6	7	8
初始值	k_{10}	0.06	0.06	0.06	0.06	0.01	0.01	0.6	0.6
	k_{20}	0.2	0.16	0.15	0.05	0.02	0.02	0.5	0.5
	k_{N_0}	0.01	0.01	0.04	0.04	0.005	0.009	0.2	0.4
输出结果	k_1^*	0.06397	0.06335	0.06023	0.06056	0.06173	0.061621	0.05925	0.05588
	k_2^*	0.15817	0.15536	0.151865	0.15254	0.150247	0.150669	0.15686	0.14905
	k_N^*	0.010246	0.01004	0.04007	0.04091	0.004756	0.00882	0.17379	0.35897
	J	0.50659	0.50665	0.51936	0.51665	0.51415	0.51468	0.51482	0.55199
	P	3.7×10^{-9}	9.3×10^{-10}	0.0039	9.7×10^{-4}	2.44×10^{-4}	2.44×10^{-4}	1.2×10^{-7}	1.88×10^{-9}
	M	13	4	5	49	78	78	21	24

[注]输入参数：$Q=0.001$，$P=0.5$，$Q1=0.5$，$Q5=0.00001$。

（四）多宾斯（Dobbins）BOD–DO模型参数的同时估值方法与程序

1. 多宾斯 BOD–DO模型及其参数估值的问题

（1）多宾斯 BOD-DO模型

模型的基本方程为

$$\begin{cases} u\dfrac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}x} = -(k_1+k_3)L+R \\ u\dfrac{\mathrm{d}O}{\mathrm{d}x} = -k_1L+k_2(O_s-O)-P \end{cases} \tag{3·82}$$

为表达方便将上式改写为

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}l} = -\dfrac{(k_1+k_3)}{u}b \\ \dfrac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}l} = -\dfrac{k_1}{u}b+\dfrac{k_2}{u}(c_s-c)-\dfrac{k_4}{u} \end{cases} \tag{3·83}$$

式中：k_1——耗氧系数，〔T^{-1}〕；

k_2——复氧系数，〔T^{-1}〕；

k_3——BOD沉浮系数，〔T^{-1}〕；

k_4——藻类产氧速率系数，〔$ML^{-3}T^{-1}$〕；

b、c——河水BOD和溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

c_s——河水饱和溶解氧浓度，〔ML^{-3}〕；

l——河水流经距离，〔L〕；

u——河水平均流速，〔LT^{-1}〕。

方程3.83又可改写为

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}l} = -x_1b \\ \dfrac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}l} = -x_3b+x_2(c_s-c)+x_4 \end{cases} \tag{3·84}$$

在初值条件为b_0，c_0时可得积分解为

$$\begin{cases} b = b_0\,e^{-x_1l} \\ c = c_0+\dfrac{x_4}{x_2}-\left(c_s+\dfrac{x_4}{x_2}-c_o\right)e^{-x_2l}+\left(\dfrac{x_3}{x_1-x_2}\right)\left(e^{-x_1l}-e^{-x_2l}\right) \end{cases} \tag{3·85}$$

$$x_1 = \frac{k_1 + k_3}{u} \quad (3 \cdot 86)$$

$$x_2 = \frac{k_2}{u} \quad (3 \cdot 87)$$

$$x_3 = \frac{k_1}{u} \quad (3 \cdot 88)$$

$$x_4 = -\frac{k_4}{u} \quad (3 \cdot 89)$$

式中：b_0，c_0——$l=0$的BOD和DO浓度，〔ML^{-3}〕。

按一般规律各参数又是流量和（或）温度的函数，即

$$k_1 = \theta_1 \theta_2^{(T-20)} \quad (3 \cdot 90)$$

$$k_2 = \theta_3 Q^{\theta_4} \theta_5^{(T-20)} \quad (3 \cdot 91)$$

$$k_3 = \theta_6 Q^{\theta_7} \quad (3 \cdot 92)$$

$$k_4 = \theta_8 Q^{-1} \quad (3 \cdot 93)$$

（2）估值的评价目标函数

如在河流稳定状态下，对j断面（$j=1$，…，r）进行i次($i=1$，…，n)水温(T)、流量(Q)、BOD_5（b)和溶解氧(c)的日平均浓度的实测。获得相应的数组集合。$\{b_{ij}^m\}$ {与c_{ij}^m}。

于是，可写出计算值与实测值之间的误差平方和的目标函数为

$$J_{总} = \sum_{i=1}^{n} J^i \quad (3 \cdot 94)$$

$$J^i = \sum_{j=1}^{r} \left[\lambda J_b^i + (1-\lambda) J_c^i \right]^2 \quad (3 \cdot 95)$$

$$J_b^i = \sum_{j=1}^{r} \left[b^i - b_j^{mi} \right]^2 \quad (3 \cdot 96)$$

$$J_c^i = \sum_{j=1}^{r} \left[c^i - c_j^{mi} \right]^2 \quad (3 \cdot 97)$$

式中：m——表示实测值，其余为模型计算值；λ——加权因素（$0\leqslant\lambda\leqslant1$），表示BOD和DO测量值的相对可靠性，$\lambda=0$时，指BOD不可靠，DO可靠；$\lambda=1$时，指BOD可靠，DO不可靠。

(3) 模型参数的估值问题

参数估值的问题可表达为

$$J \xrightarrow[(\theta_1,\cdots,\theta_8)^*]{} J_{min} \tag{3·98}$$

这种8维向量空间的最优搜索求解是极困难的。可以采用两步法进行参数的最优搜索求解。

第一步确定各次的x_1^i，…，x_4^i

即
$$J^i \xrightarrow[(x_1^i,x_2^i,x_3^i,x_4^i,)^*]{} J_{min} \tag{3·99}$$

这是4维向量空间的最优搜索问题。

第二步确定θ_1，…，θ_8

根据第一步所估的x_h^i值（$h=1$，…，4）和由方程(3·90)—(3·93)计算得到的x_h（θ，T_i，Q_i），组成误差平方和为目标，进行最优搜索求解θ_1，…，θ_8。即

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{h=1}^{4}\left[x_h(\theta,T^i,Q^i)-x_h^i\right]^2 \xrightarrow[(\theta_1,\cdots,\theta_8)^*]{} \min \tag{3·100}$$

这是分别属于2，3，2和1维的最优搜索问题。

2. 多宾斯BOD-DO模型参数估值方法

方法1

用4维最优搜索程序求解x_1^i，x_2^i，x_3^i，x_4^i。

$$J^i \xrightarrow[(x_1^i,\cdots,x_4^i)^*]{} J^i{}_{min} \tag{3·101}$$

方法 2

用降为 2 维最优搜索程序求解x_1^i，x_2^i。

对方程(3·95)分别求$\frac{\partial J^i}{\partial x_3^i}$和$\frac{\partial J^i}{\partial x_4^i}$，并使导数为零，得

$$\left(\sum_{j=1}^{r} p_j^2\right)x_3^i + \left(\sum_{j=1}^{r} p_j q_j\right)x_4^i = -\sum_{j=1}^{r} p_j R_j$$

$$\left(\sum_{j=1}^{r} p_j q_j\right)x_3^i + \left(\sum_{j=1}^{r} q_j^2\right) x_4^i = -\sum_{j=1}^{r} q_j R_j \tag{3·102}$$

$$x_3^i = \frac{\begin{vmatrix} -\Sigma p_j R_j & \Sigma p_j q_j \\ -\Sigma q_j R_j & \Sigma q_j^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \Sigma p_j^2 & \Sigma p_j q_j \\ \Sigma p_j q_j & \Sigma q_j^2 \end{vmatrix}} = x_3^i(x_1^i,\ x_2^i) \tag{3·103}$$

$$x_4^i = \frac{\begin{vmatrix} \Sigma p_j^2 & -\Sigma p_j R_j \\ \Sigma p_j q_j & -\Sigma q_j R_j \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \Sigma p_j^2 & \Sigma p_j q_j \\ \Sigma p_j q_j & \Sigma q_j^2 \end{vmatrix}} = x_4^i(x_1^i,\ x_2^i) \tag{3·104}$$

式中：

$$p_j = \frac{b_0}{x_1^i - x_2^i}\left(e^{x_1^i l_j} - e^{-x_2^i l_j}\right) \tag{3·105}$$

$$q_j = \frac{1}{x_2^i}\left(1 - e^{-x_2^i l_j}\right) \tag{3·106}$$

$$R_j = c_s\left(1 - e^{-x_2^i l_j}\right) + c_0 e^{-x_2^i l_j} - c_j^m \tag{3·107}$$

将式（3·103)和(3·104）代入式（3.99)，则$J^i = J^i$（x_1^i，x_2^i）。即成 2 维最优搜索问题。

方法 3

取 λ = 1 （只用BOD数据）：

① 由 $J^i = J_b^{ij} = \sum_{j=1}^{r}\left[b(l_j, x_1^i, b_0^i) - b_j^i\right]^2$

按一维最优搜索法可求解出x_1^i 。

②用算得的x_1^i 及式（3·103）和（3·104）的$x_3^i = x_3^i$

（x_1^i，x_2^i）和x_4^i（x_1^i，x_2^i）代入

$$J_c^i = \sum_{j=1}^{r}\left[c(l_j, x_1^i, \cdots, x_4^i, b_0^i, c_0^i) - c_j^i\right]^2$$

按一维最优搜索法可解得x_2^i以及x_3^i和x_4^i。

方法4

取 λ = 0 （只用DO数据），

以式（3·103）和（3·104）的$x_3^i = x_3^i$（x_1^i，x_2^i）和

x_4^i（x_2^i，x_2^i）代入

$$J_c^i = \sum_{j=1}^{r}\left[c(l_j, x_1^i, \cdots, x_4^i, b_0^i, c_0^i) - c_j^i\right]^2$$

按二维最优搜索求解x_1^i，x_2^i 以及x_3^i和x_4^i

3. 多宾斯BOD-DO模型参数估值（用降维法）的计算流图。

(1) 总流程框图（图3-19）

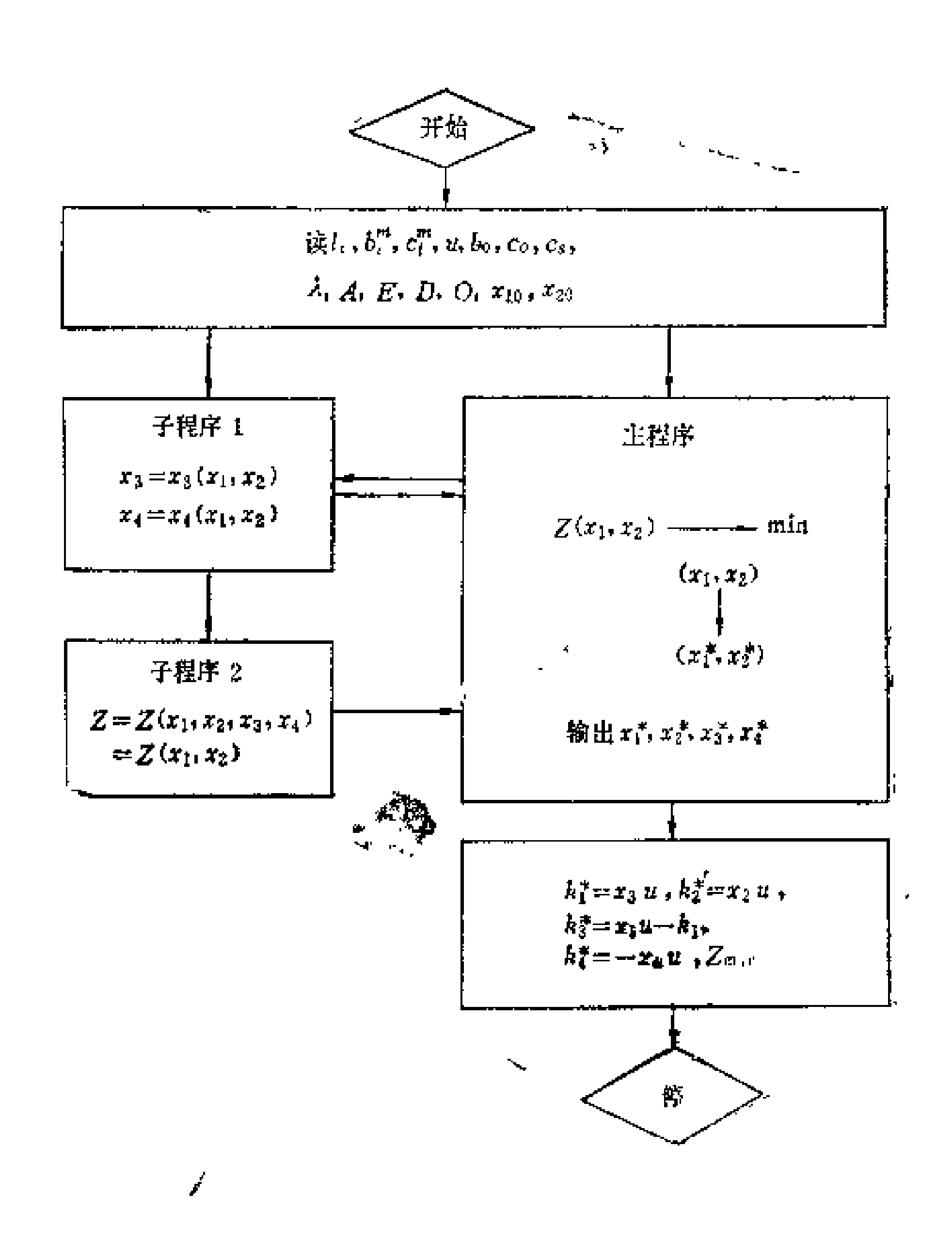


图3-19　多宾斯BOD-DO模型参数估值的总流程图(一阶梯度法)

（2）主程序（图3-20）

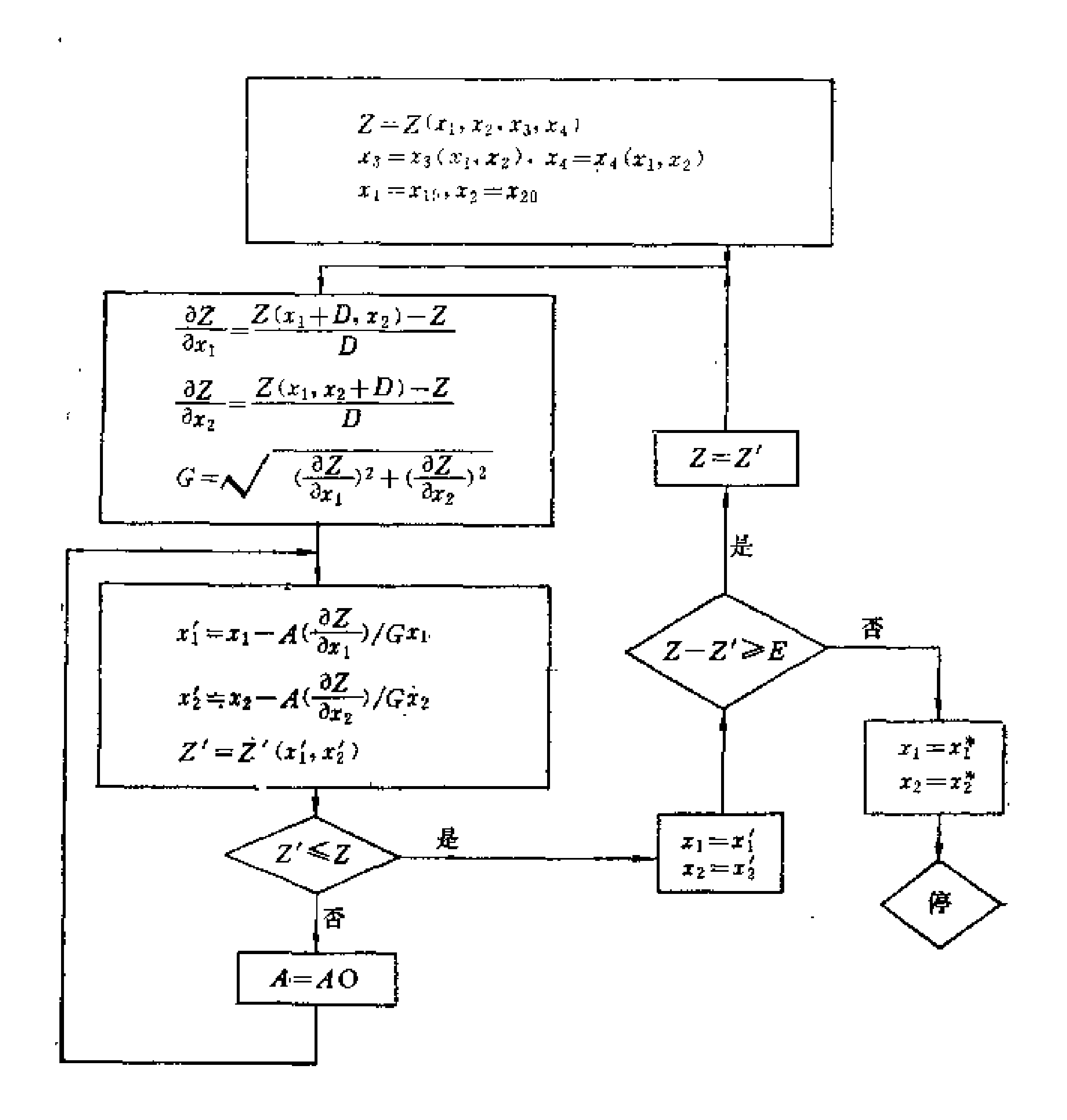


图3-20　多宾斯BOD-DO模型参数估值的主程序图(一阶梯度法)

（3）子程序1（图3-21）

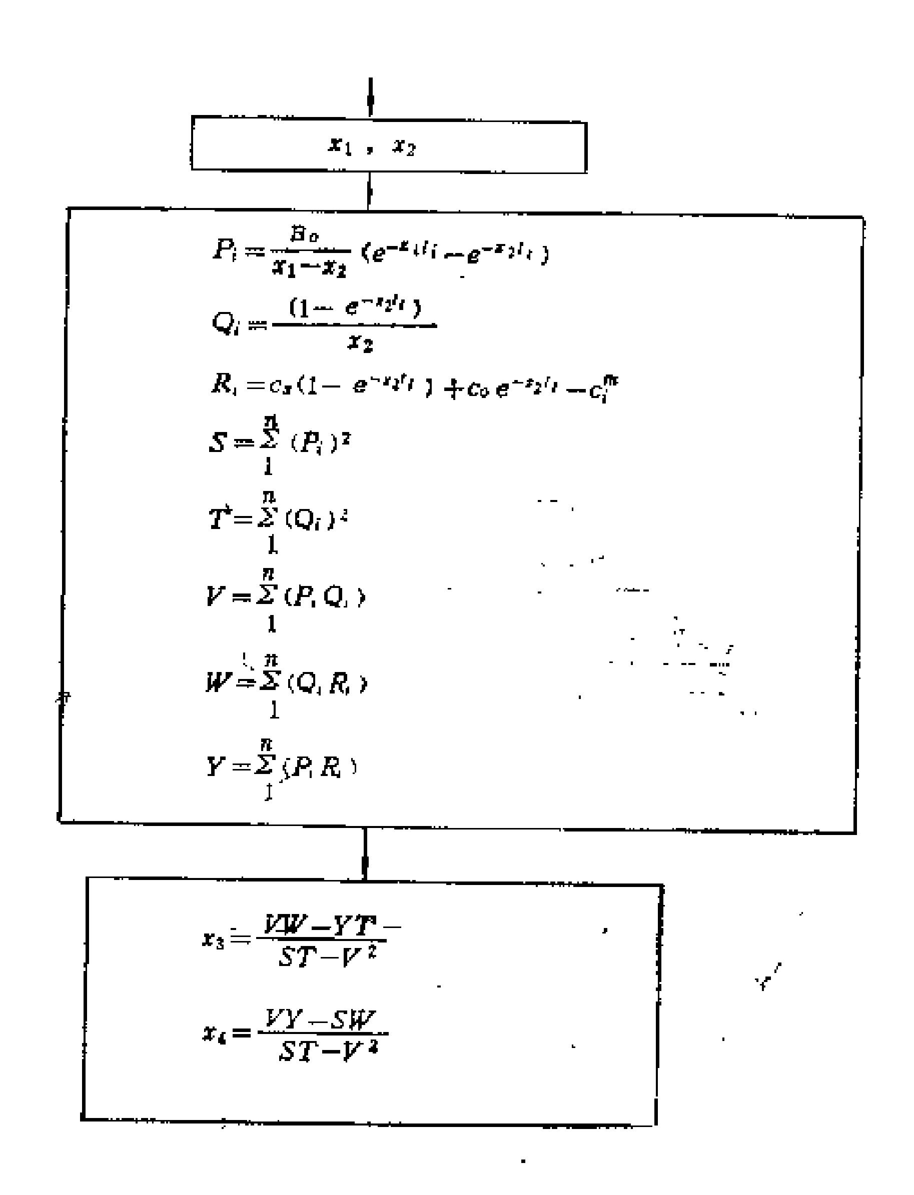


图3-21 多宾斯BOD-DO模型参数估值的子程序1（一阶梯度法）

（4）子程序 2 （图3-22）

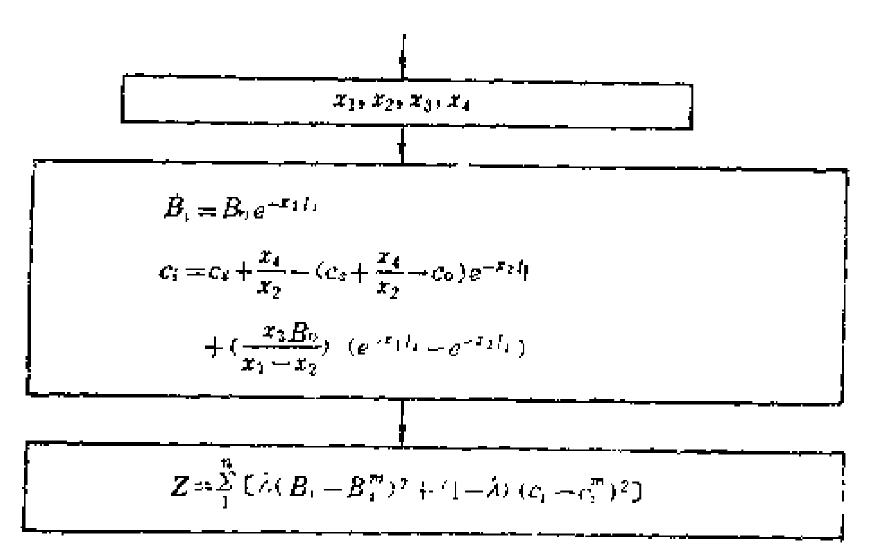


图3-22　多宾斯BOD-DO模型参数估值的子程序2（一阶梯度法）

【例题3-20】

已实测到某河段的如下同步水质数据（见表3-16）。

表3-16　河　流　实　测　资　料

河流断面号	0	1	2	3	4
河水流经距离 l_i(km)	0	2	4	6	8
实测BOD b_j^m (mg/l)	25	22.6	20.5	18.5	16.8
实测 DO c_i^m(mg/l)	9.2	8.4	7.85	7.15	7.5
平均流速 (km/d)	20				
河水饱和DO c (mg/l)	12.5				

求：参数k_1、k_2、k_3、k_4。

用一阶梯度法对多宾斯BOD-DO模型（采用由四维参数降维转化为二维参数变量的模型），进行最优化搜索。利用上述搜索程序，对 8 组不同初始值，求得表3-17的 8 组结果。各组参数值及其目标值之间有很大差别：$k_1 = -1.3713$—0.4659，$k_2 = 3.8533$—12.0476，$k_3 = 0.5279$—2.3648，$k_4 = 12.6846$—88.1296。其

中以第5组，目标值相对最小（为0.0756）。故相对参数最优解为：

$$k_1^* = 0.4659, \qquad k_2^* = 3.8533,$$

$$k_3^* = 0.5279, \qquad k_4^* = 12.6846。$$

表3-17 多宾斯BOD-DO模型参数的最优化搜索（一阶梯度法）

试验组数	待定参数初始值		估得的各参数值				估得的
	x_{10}	x_{20}	x_1 / k_1	x_2 / k_2	x_3 / k_3	x_4 / k_4	最小目标值
1	0.25	0.29	0.0497 / 0.0136	0.2905 / 5.8109	0.0006 / 0.9809	-1.5503 / 31.0063	0.0831
2	0.10	0.29	0.0498 / 0.0157	0.2900 / 5.8014	0.0007 / 0.9818	-1.5460 / 30.9210	0.0826
3	0.04	0.29	0.0496 / 0.0001	0.2935 / 5.8705	0.0000 / 0.9928	-1.5780 / 31.5604	0.0839
4	0.05	0.08	0.0497 / 0.4250	0.2014 / 4.0285	0.0212 / 0.5690	-0.7167 / 14.3345	0.0763
5	0.05	0.07	0.0496 / 0.4659*	0.1926 / 3.8533*	0.0232 / 0.5279*	-0.6342 / 12.6846*	0.0756*
6	0.05	0.20	0.0495 / 0.2335	0.2429 / 4.8581	0.0116 / 0.7565	-1.1046 / 22.0939	0.0819
7	0.05	0.40	0.0499 / -0.6604	0.4407 / 8.8145	-0.0330 / 1.6596	-2.9332 / 58.6655	0.0930
8	0.05	0.50	0.0496 / -1.3713	0.6023 / 12.0476	-0.0685 / 2.3648	-4.4064 / 88.1296	0.1027

二 “计算机扫描计算-图解-梯度搜索法”求解河流水质模型的最优参数值

河流水质模型通常包含多个待定参数。用梯度法对河流水质模型的多参数进行搜索时，先人为给出一组多参数的初始值作为

搜索的起点，然后以水质的理论计算值与现场实测值两者之差的平方和作为评价优劣的目标，进行误差最小的搜索。由于这些待定参数变量与误差平方和的目标变量之间，一般都形成多峰函数，因此随所选择的待估参数初始值的不同，将搜索到该函数不同峰值的极小点，从而使估出的"最优"参数的结果各不相同。

以〔例题3-20〕来说，8种不同的初始值，求得不同的参数值及不同的目标值，其间的差别可以很大。如果任意选择一组待定参数的初始值，并就依其搜索到的"最小"目标值和相应的参数值作为搜索的结果，就很容易造成重大的误差。虽然我们可以采用以下两个措施：1）参考经验的判断，把待估参数的初始值选在合理的可行范围内，以缩小搜索的区间，2）对各种可行的初始值组合进行广泛的试验，再根据各目标值的大小比较，择优选定，但这种随机性试算比较法，不仅工作量很大，而且仍然不能避免容易造成很大误差的问题，最多也只能随试验次数的增加而搜索到近似的最优解。以〔例题3-20〕来说，在8组随机性试验结果中，以第5组的目标值最小（0.0756），选择该组参数值作为求解结果；对此结果可以进行以下的检验。

用估得的k_1^*、k_2^*、k_3^*、k_4^*及河流起始断面的实测数据，输入多宾斯模型，作下游4个断面的水质预测，得b_i和c_i，与原给定的实测值b_{mi}和c_{mi}相比较，得到检验结果。溶解氧（DO）的检验为

河流断面号 i	1	2	3	4
河水流经距离l_i(km)	2	4	6	8
计算的DO值c (mg/l)	10.4	11.3	11.98	12.5
实测的DO值c_{m_i}(mg/l)	8.4	7.85	7.15	7.5
误差 %	19.2	30.5	40.3	40.0

其平均误差达32.5%，最大误差达40.3%。若选择其它初始值的试验结果，其误差将更大。

由此可见，河流水质模型的多参数同时估值法，虽然在理论上要比单参数估值法具有整体考虑各参数间相互关联的优点，但又存在着不易得到全局最优解，各人计算出的结果各不相同的问题，这一缺陷妨碍了河流水质模型的建立及其应用，是开展水质模型预测工作中有待解决的关键问题。

针对上述问题，作者研究了"计算机扫描计算-图解-梯度搜索法"对河流水质模型进行了最优参数估值，获得了满意的结果。

（一）河流常用BOD-DO模型参数的"计算机扫描计算-图解-梯度搜索法"最优估值的基本原理。

方法的基本原理可概括为：

通过计算机对待定参数变量与误差目标变量关系函数的扫描计算（或扫描计算与绘图），配合计算者的有序判断和选择（也可以直接自动由计算机完成），在有限的次数和大小不同的区间内，直接搜索出"全局近似最优解"；然后以"全局近似最优解"作为初始值，用梯度法搜索得到"全局最优解"。

其工作步骤可归纳为：

1）为了计算机绘图计算的需要，对含有两个以上待定参数变量的水质模型进行函数的改型，使原来的多维关系函数，变成由两个参数变量和一个目标变量所组成的三维结构，以便绘制直观的三维立体图形。原函数的改型可以采用原函数求导得到的关系式（3·103）和（3·104）降维方法来实现。

2）为了求得"全局近似最优解"可采用人——机配合的方式，逐次进行区域从大到小的直接寻优，直到误差满意为止。

由计算机对已规定的参数变量区间，按选定的坐标原点和搜索步长，顺序一一计算出相应两个参数变量坐标（x轴和y轴）的目标变量坐标值（z轴），并绘制其立体图形，同时计算机还自动逐一比较和最后打印出该区间的最小目标值及其对应的参数值。

由试验人根据计算机在某区间已算出的最优坐标极值点，并参考直观图形所提供的较优区间的信息，经简单的校验判断，确定下一次寻优的区间。实际上，一般可以取计算机已算得的上一个极值点的前、后各一个步长之间的范围作为x、y轴的新区间，依此重新给出计算的适当坐标原点和搜索步长，让计算机对相对步长更小、图形放得更大的新小区间再次进行计算与绘区。

以上的程序重复约3—5次，最小目标值及其相应参数值将收敛到一个稳定的数值。从而获得了整个区间的“近似最优解”。

由于所计算与绘图的函数为连续函数，因此只要第1次所选择的搜索步长基本在参数变量允许误差范围之内，则整个计算过程就不会产生突变性引起的重大误差。

上述寻优操作过程，也可改编成完全由计算机自动计算的程序。

3）为了保证计算的精度，可以进一步以上述“全局近似最优解”作为待估参数的初始值，采用一般梯度法进行最优搜索，最后获得“全局的精确最优解”。

（二）多宾斯BOD-DO模型的“计算机扫描计算-图解-梯度搜索”最优参数估值流程图

1. 总流程框图（图3-23）

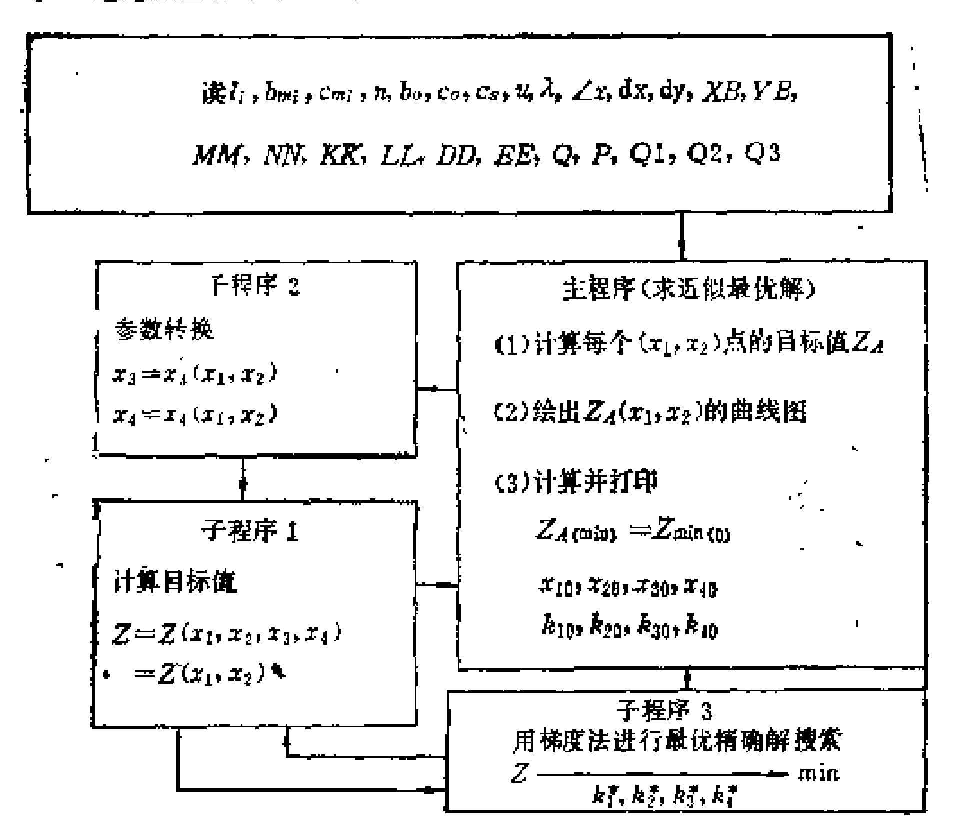


图3-23 多宾斯BOD-DO模型的"计算机扫描计算-图解-梯度搜索"最优参数估值的总流程框图

2. 主程序（图3-24）

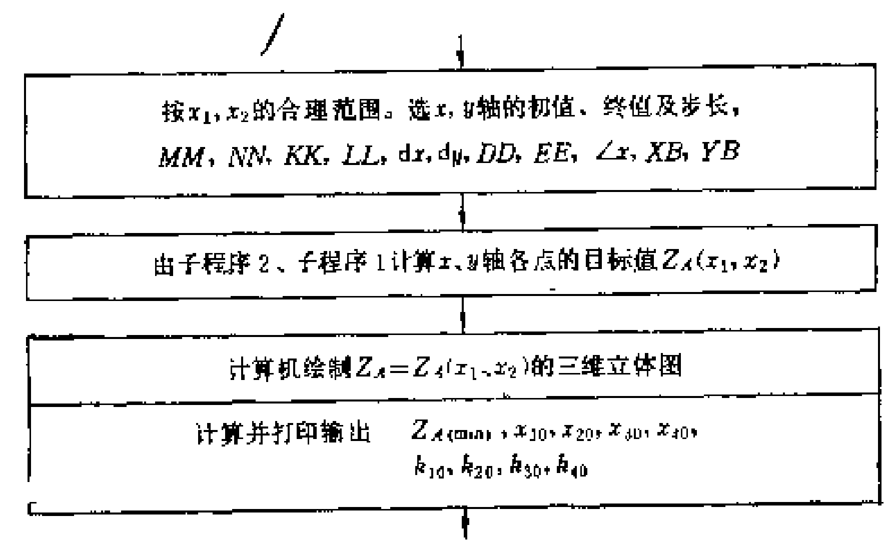


图3-24 主程序

3. 子程序1（图3-25）

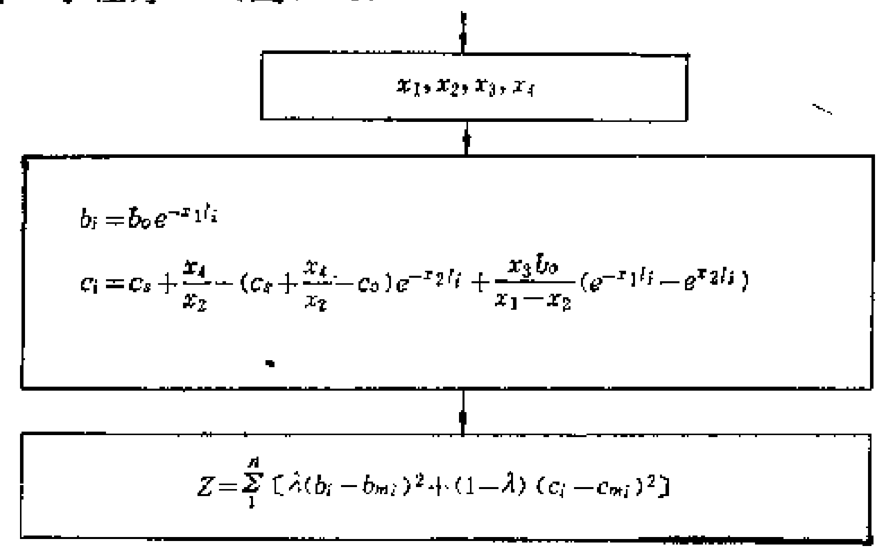


图3-25　子程序 1

4. 子程序2（图3-26）

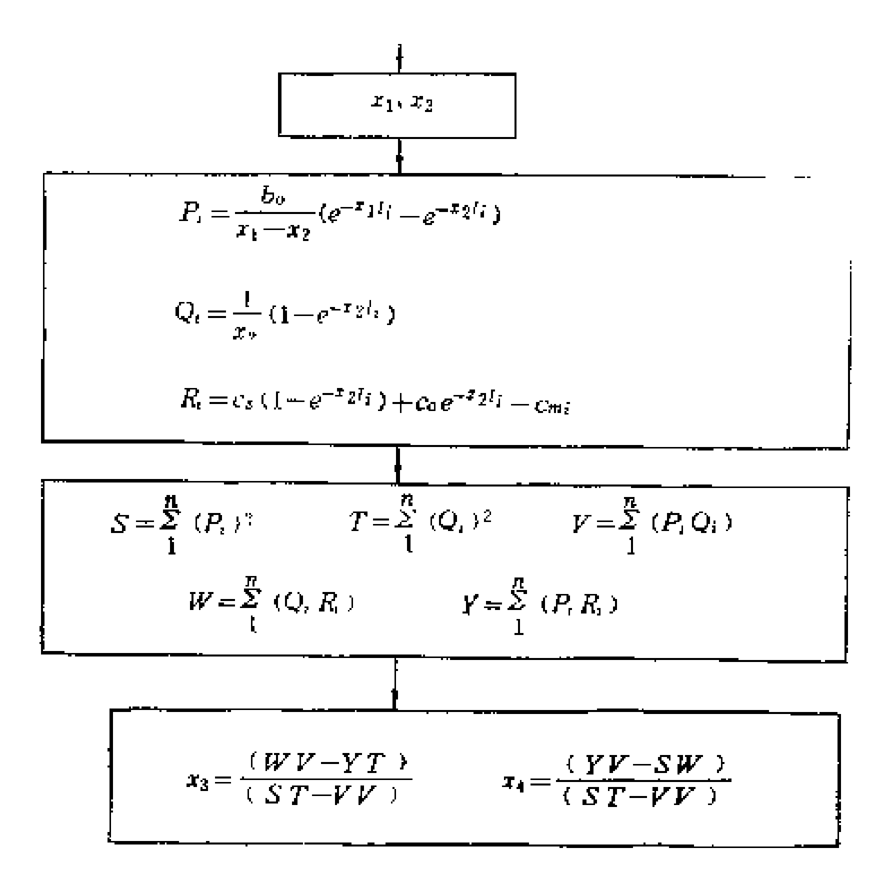


图3-26　子程序 2

5． 子程序 8 （图3-27）

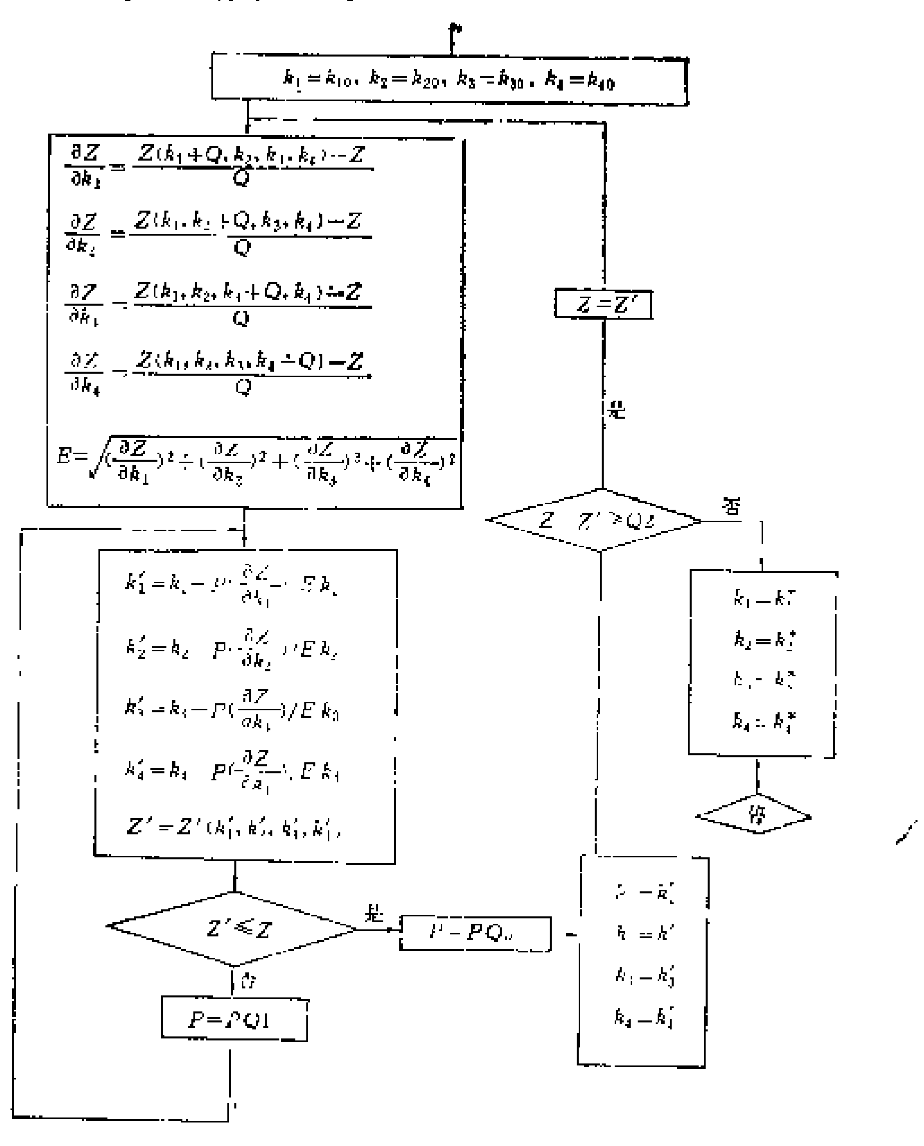


图3-27　子程序 3

最优参数估值流程的符号对照表

i——河流断面号（$i=0, 1, \cdots n$）

b_{mi}——第 i 断面实测河水BOD

c_m——第 i 断面实测河水DO

λ——BOD和DO实测值的相对可靠性系数（λ＝0—1）

Z_A——绘图过程中的目标值

$\angle x$——绘图时x轴角度

MM——x轴方向循环初值

NN——x轴方向循环终值

KK——y轴方向循环初值

LL——y轴方向循环终值

Z——梯度法搜索过程目标值

P——搜索步长

Q——搜索时参数增量

$Q1$——步长修正系数

$Q2$——目标收敛的误差要求

$Q3$——步长恢复系数

k_{10}——绘图所得k_1的近似值

k_{20}——绘图所得k_2的近似值

k_{30}——绘图所得k_3的近似值

k_{40}——绘图所得k_4的近似值

n——河流断面数，n

c_{mi}——第i断面实测河水DO

$Z_{min(0)}$——绘图所得目标近似最小值

DD——绘图x坐标起点

EE——绘图y坐标起点

dx——绘图x轴步长

dy——绘图y轴步长

XB——x轴绘图放大倍数

YB——y轴绘图放大倍数

Z_{min}——搜索所得目标精确最小值

$\frac{\partial Z}{\partial K_1}$，$\frac{\partial Z}{\partial K_2}$，$\frac{\partial Z}{\partial K_3}$，$\frac{\partial Z}{\partial K_4}$——搜索梯度

k_1^*——搜索得到的k_1精确值

k_2^*——搜索得到的k_2精确值

k_3^*——搜索得到的k_3精确值

k_4^*——搜索得到的k_4精确值

（其它符号说明同前）

（三）河流常用BOD-DO模型参数的"计算机扫描计算-图解-梯度搜索法"最优估值运算实例及其结果检验。

【例题3-21】多宾斯BOD-DO模型的最优参数估值的算例之一

对例3-20的数据用"计算机扫描计算—图解—梯度搜索法"进行估值，按上述计算框图编制的计算机程序计算（计算机自动一次计算程序）结果是：

$$\left.\begin{aligned} k_1^* &= 1.3818 \\ k_2^* &= 0.7\times10^{-7} \\ k_3^* &= -0.3841 \\ k_4^* &= 23.9367 \end{aligned}\right\} \quad J_{min}^* = 0.0585$$

结果的检验：

河流断面号 i	1	2	3	4
河水流经距离 l_i km	2	4	6	8
计算的BOD值 b (mg/l)	22.626	20.478	18.533	16.773
实测的BOD值 b_m (mg/l)	22.6	20.5	18.5	16.8
计算的DO值 c_i (mg/l)	8.306	7.724	7.424	7.381
实测的DO值 c_m (mg/l)	8.4	7.85	7.15	7.5
误　差 (BOD) %	0.12	0.11	0.18	0.16
误　差 (DO) %	1.1	1.6	3.8	1.6

由此可见DO的平均误差为2%，最大误差为3.8%。比一般梯度搜索法的多组试验选优结果（平均误差32.5%，最大误差40.3%）有明显的改善。

【例题3-22】多宾斯BOD-DO模型的最优参数估值算例之二

已知：某河段以下实测数据

河段起始点河水　$b_0 = 20mg/l$，　$c_0 = 9.2mg/l$

$c_s = 12.5mg/l$，　$u = 20km/d$

河水流经距离 l_i (km)	2	4	6	8
BOD b_{mi} (mg/l)	14.93	11.14	8.314	6.21
DO c_{mi} (mg/l)	7.41	6.95	7.37	8.35

求：k_1^*，k_2^*，k_3^*，k_4^*

解：运算结果(表3-18)，经3次，误差目标值已达0.0000134，搜索到的参数已稳定，搜索结果　$k_1^* = 2.6855$，$k_2^* = 1.3799$，$k_3^* = 0.2393$，$k_4^* = 22.7013$。搜索过程中第一次与第8次图解和搜索的图形与数据如表（3-19）与图（3-28）、图（3-29）。

结果的检验如下：

用估得的最优参数k_1^*、k_2^*、k_3^*、k_4^*及起始点的实测数据代入多宾斯模型的模拟计算程序，进行下游四个断面的水质预测，得b_i和c_i，其结果与原给定的实测数据 b_{mi}和c_{mi} 相比较。两者的最大误差小于万分之3.5，（见表3-20）。

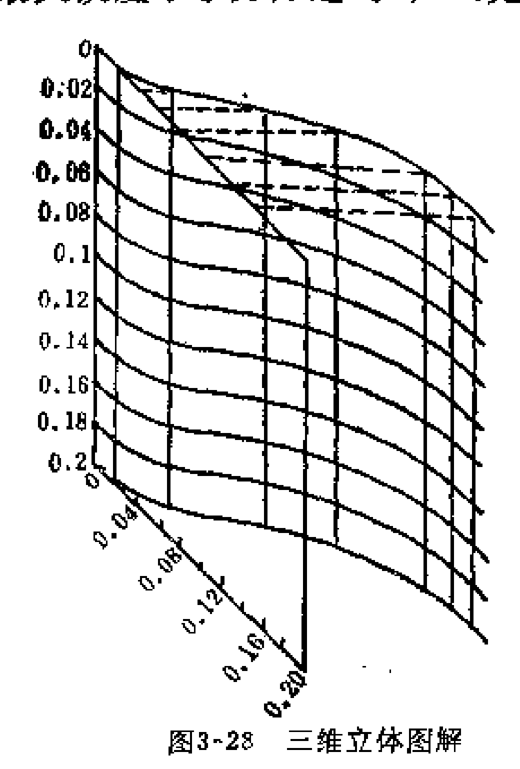


图3-28　三维立体图解

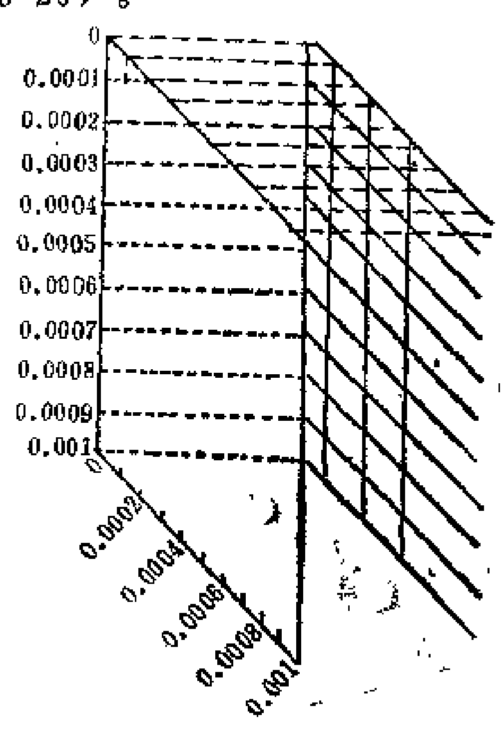


图3-29　三维立体图解

表3-18 多宾斯BOD-DO模型参数的"扫描计算-图解-梯度搜索法"最优估值算例

试验次数号	近似解的图解搜索结果					精确解的搜索结果				
	选择的区间	原点	步长	极值点	目标值	搜索得参数值				目标值
	$\frac{x_{11}-x_{12}}{x_{21}-x_{22}}$	$\frac{DD}{EE}$	$\frac{dx}{dy}$	$\frac{x_1}{x_2}$	J_{min}	k_1	k_2	k_3	k_4	J_{min}
1	0—0.2 0—0.2	0 0	0.02 0.02	0.14 0.08	0.158703	2.7636	1.5708	0.1583	22.7902	0.023156
2	0.14—0.15 0.07—0.08	0.14 0.07	0.001 0.001	0.146 0.07	0.00026	2.6882	1.3991	0.2349	22.6516	0.000020
3	0.146—0.147 0.069—0.07	0.146 0.069	0.0001 0.0001	0.1463 0.069	* 0.000019	* 2.6855	* 1.3799	* 0.2393	* 22.7013	* 0.0000134

表3-19　多宾斯BOD-DO模型最优参数估值搜索的图形与数据

DATA:	DATA:
N = 4	N = 4
LEM = 0.5	LEM = 0.5
B0 = 20	B0 = 20
C0 = 9.2	C0 = 9.2
C = 12.5	C = 12.5
U = 20	U = 20
KX = 45	KX = 45
dx = 0.02	dx = 0.0001
dy = 0.02	dy = 0.0001
XB = 10	XB = 10
YB = 20	YB = 20
MM = 0	MM = 0
NN = 10	NN = 10
KK = 0	KK = 0
LL = 10	LL = 10
DD = 0	DD = 0.146
EE = 0	EE = 0.069
Q = 0.0001	Q = 0.0001
P = 0.5	P = 0.5
Q1 = 0.5	Q1 = 0.5
Q2 = 0.00001	Q2 = 0.00001
Q3 = 1.2	Q3 = 1.2
JMIN0 = 0.158703	JMIN0 = 0.000019
dX = 0.0200	dX = 0.0001
dY = 0.0200	dY = 0.0001
X1 = 0.1400	X1 = 0.1463
X2 = 0.0800	X2 = 0.0690
K10 = 2.7364	K10 = 2.6863
K20 = 1.6000	K20 = 1.3800
K30 = 0.0635	K30 = 0.2396
K40 = 22.8651	K40 = 22.7014
RESULTS:	RESULTS:

JMIN = 0.0023156　　　JMIN = 0.0000134

K1 = 2.7638　　　K1 = 2.6855

K2 = 1.5708　　　K2 = 1.3799

K3 = 0.1583　　　K3 = 0.2393

K4 = 22.7902　　　K4 = 22.7013

表3-20　多宾斯模型参数最优估值结果的检验

河流断面号 i	1	2	3	4
河水流经距离 l_i (km)	2	4	6	8
用最优估值参数预测BOD值 b_i	14.9282	11.1426	8.3169	6.2078
参数估值时所用的实测BOD值 b_{mi}	14.93	11.14	8.314	6.21
用最优估值参数预测的DO值 c_i	7.4106	6.9512	7.3716	8.3503
参数估值时所用的实测DO值 c_{mi}	7.41	6.95	7.35	8.35

【例题3-23】托马斯模型的最优参数估值

已知：某河段以下实测数据

河段起始点河水　$b_0 = 12\text{mg/l}$，　$c_0 = 8.43\text{mg/l}$，

$c_s = 9.2\text{mg/l}$，　$u = 4\ \text{km/d}$

河水流经距离 l_i (km)	4	8	16	32	40
BOD　b_{mi}　(mg/l)	10.72	9.58	7.649	4.875	3.392
DO　c_{mi}　(mg/l)	5.995	4.508	3.303	3.935	4.68

求：k_1^*，k_2^*，k_3^*

解：运算（表3-21）经6次，误差目标已为0.000005，

参数已稳定，结果为：$k_1^* = 0.27312$，$k_2^* = 0.3196$，

$k_3^* = -1.6056$。

表3-21 托马斯BOD-DO模型参数的“计算机扫描计算-图解-梯度搜索法”最优估值算例

试验次数号	近似解的图解搜索结果					精确解的梯度法搜索结果			
	选择的区间	原点	步长	极值点	目标值	参数值			目标值
	$\frac{x_{11}-x_{12}}{x_{21}-x_{22}}$	$\frac{DD}{EE}$	$\frac{dx}{dy}$	$\frac{x_1}{x_2}$	$J_{min}(0)$	k_1	k_2	k_3	J_{min}
1	0—0.5	0	0.05	0.05	9.72735	0.25043	0.28392	—0.13700	0.05928
	0—0.5	0	0.05	0.05					
2	0—0.1	0	0.01	0.03	0.12955	0.27577	0.32104	—0.16322	0.00226
	0—0.1	0	0.01	0.08					
3	0.02—0.04	0.02	0.002	0.028	0.00083	0.27356	0.31955	—0.16132	0.00072
	0.07—0.09	0.07	0.002	0.08					
4	0.026—0.03	0.026	0.0004	0.028	0.00083	0.27356	0.31955	—0.16132	0.00072
	0.076—0.08	0.076	0.0004	0.08					
5	0.0276—0.0286	0.0276	0.0001	0.0281	0.00008	0.27322	0.32000	—0.16082	0.00008
	0.0796—0.0806	0.0796	0.0001	0.08					
6	0.028—0.0282	0.028	0.00002	0.02814	0.000005	0.27312	0.31960	—0.16056	0.000002
	0.0799—0.0801	0.0799	0.00002	0.0799					

结果的检验如下：

用估得的k_1^*，k_2^*，k_3^*及起始点数据输入托马斯模型预测程序，作下游5个断面水质预测，得b_i和c_i与原实测值b_{mi}和c_{mi}比，最大误差小于万分之2.3，（见表3-22）。

表3-22 托马斯模型参数最优估值结果的检验

河水断面号 i	1	2	3	4	5
河水流经距离 l_i (km)	4	8	16	32	40
最优参数的BOD预测值 b_i	10.7225	9.5810	7.6497	4.8765	3.8935
参数估值所用BOD实测值 b_{mi}	10.72	9.58	7.649	4.875	3.892
最优参数的DO预测值 c_i	5.9954	4.5084	3.3028	3.9350	4.6802
参数估值所用DO实测值 c_{mi}	5.995	4.508	3.303	3.935	4.68

【例题3-24】斯特里特-费尔普斯模型的最优参数估值

已知：某河段以下实测数据。河水起始点：$b_0=20\text{mg/l}$，$c_0=10\text{mg/l}$，　$c_s=10\text{mg/l}$　$u=4\ \text{km/d}$

河水流经距离 l_i (km)	8	28	36	56
BOD　b_{mi}　(mg/l)	17.928	13.783	12.392	9.50
DO　c_{mi}　(mg/l)	8.335	6.750	6.6536	6.932

求：k_1^*，k_2^*

解：运算（表3-23）经6次，误差目标低达0.0000007，参数已稳定，结果为$k_1^*=0.0531799$，$k_2^*=0.19534$。

结果的检验：

用估得的k_1^*，k_2^*及起始点数据输入S-P模型预测计算程序，对下游4个断面作水质预测，得b_i和c_i。与原实测值b_{mi}和c_{mi}相比，两者最大误差小于万分之4.3，（见表3-24）。

表3-23　斯特里特—费尔普斯BOD-DO模型参数的“计算机扫描计算-图解-梯度搜索法”最优估值算例

试验次序号	近似解的图解搜索结果					精确解的梯度法搜索结果		
	选择的区间	原点	步长	极值点	目标值	搜索的参数值		目标值
	$\frac{k_{11}-k_{12}}{k_{21}-k_{22}}$	$\frac{DD}{EE}$	$\frac{dx}{dy}$	$\frac{k_{10}}{k_{20}}$	$f_{min}(0)$	k_1	k_2	f_{min}
1	0—0.1	0	0.01	0.05	0.2701226	0.0531984	0.1984857	0.0021222
	0—0.5	0	0.05	0.2				
2	0.04—0.06	0.04	0.002	0.054	0.014866	0.053203	0.198628	0.002302
	0.15—0.25	0.15	0.01	0.2				
3	0.052—0.057	0.052	0.0005	0.053	0.00082	0.053082	0.191109	0.00082
	0.19—0.21	0.19	0.002	0.194				
4	0.0525—0.0535	0.0525	0.0001	0.0532	0.00001	0.053174	0.195497	0.000008
	0.192—0.197	0.192	0.0005	0.1955				
5	0.053—0.0535	0.053	0.00005	0.0532	0.000008	0.053174	0.195399	0.000003
	0.195—0.196	0.195	0.0001	0.1954				
6	0.05315—0.05325	0.05315	0.00001	0.05318	0.0000007	*0.0531790	*0.19534	*0.0000007
	0.1953—0.1954	0.195	0.00002	0.19534				

表3-24　斯特里特-费尔普斯模型参数最优估值结果的检验

河流断面号 i	1	2	3	4
河水流经距离 l_i (km)	8	28	36	56
最优参数的BOD预测值 b_i	17.98205	13.78360	12.39287	9.49938
参数估值所用BOD实测值 b_{mi}	17.982	13.783	12.392	9.500
最优参数的DO预测值 c_i	8.33532	6.74998	6.65378	6.93213
参数估值所用DO实测值 c_{mi}	8.335	6.75	6.651	6.932

三　"复合形法"求解最优参数值

（一）复合形法（Complex）简介

在n维空间中，由$n+1$个顶点（vertex）构成的图形为该空间中最简单的图形，称做单纯形（simplex）。而由大于$n+1$个顶点构成的图形则称为复合形（complex）。复合形法是从单纯形法发展而来的，它是用于不等式约束条件下直接搜索的一种最优化方法。其基本思路是在满足约束条件的可行域内构成一个复合形，其每个顶点的不同坐标分量表示不同的参数，分别求各顶点的目标函数值，比较其大小，舍弃最大值点，按照一定的规律扩张或收缩到新点，计算新点的目标函数值，再进行比较，直到目标函数达到收敛要求，即复合形收缩到一个"点"（得到所求的最优点）。该点的各坐标分量值表示所估参数的最优值。

这种方法的特点是不必计算梯度，不用一维搜索求最优，因而程序简单，但该方法不是单调收敛的。

复合形法求优操作过程如下：

（1）最优搜索的目标函数及约束条件

取水质控制指标c的计算值和实测值之差的范数（如平方和）为目标函数，即

$$\begin{cases} Z=\sum_{j=1}^{m}\left| c_j - c_j^m \right|^2 = Z(K) \longrightarrow \min & (3\cdot108) \\ D \leqslant K \leqslant E & (3\cdot109) \end{cases}$$

式中： K——为待估参数向量（n维），

$K=(k_1\ \ k_2\ \ \cdots,\ k_n)^T$；

D，E——参数序列 $\{k_i\}$ 的上、下限约束边界值，

$D=(d_1,\ d_2,\ \cdots,\ d_n)$，

$E=(e_1,\ e_2,\ \cdots,\ e_n)$；

c_j, c_j^m——第j河流断面某一水质指标的计算值与实测值浓度。

（2）初始复合形顶点的形成：

$$K_l = D + \gamma_s\ (E - D) \qquad (3\cdot110)$$

$$(l=1,\ 2,\ \cdots,\ s)$$

式中： r_s——为（0－1）区间上的任意一数，共须形成大于$n+1$个顶点：k_1，k_2，k_3，…，k_s；

s——顶点数，$s>(n+1)$，

（3）新顶点的搜索规则

1）计算s个顶点的目标函数值，并按其大小重新排列，相应Z_1，Z_2，…，Z_s的顶点为K_1，K_2，…，K_s（其中$Z_1<Z_2<\cdots<Z_s$），相对最大值点k_s称为最坏顶点，最小值点k_1为最好顶点。将最坏顶点k_s舍弃，代之以它的反射点k_γ，〔如图3-30（a）〕。

$$K_r = G + \alpha\ (G - K_s) \qquad (3\cdot111)$$

式中： G——除最坏点K_s外其余（$S-1$）个顶点的重心

$$G=\frac{1}{S-1}\sum_{l=1}^{S-1}K_l;$$

α——反射因子（reflection factor），一般取$\alpha=1.3$。

2）若 K_r 序列中的某些元素如 k_{re}违反约束条件，则以边界值

d_e或 e_e 取代k_{re}。若K_r满足约束条件，则以K_r代替点 K_s，并求新点K_r的目标函数Z_r。

3）当$Z_1<Zr<Z_{s-1}$，则以新点 K_r代替最坏点 K_s。按上述搜索规则继续搜索，不断舍弃坏顶点，直到目标函数值达到一定精度要求，图形收缩到趋向一点。

4）当$Z_r<Z_1$，这时K_r为新的最好点，可将它再推进一步，称为扩张，〔如图3-30（b）〕即取

$$K_e = G + \beta\ (K_r - G) \qquad (3\cdot112)$$

式中：　β——扩张系数，$\beta>1$。

若相应 K_e 的$Z_e<Z_r$，则称为扩张成功，可以 K_e 代替K_s。否则扩张失败，仍以K_r代替K_s，并继续搜索新顶点。

5）当$Z_r>Z_{r-1}$时，则K_r为新的最坏点，这时应当收缩〔如图3-30（c)〕，取

$$K_G = G + \gamma\ (K_\gamma - G) \qquad (3\cdot113)$$

式中：　γ——收缩系数，$0<\gamma<1$。

若相应 K_G的$Z_G<Z_{s-1}$，称收缩成功，可以 K_G 代替 K_s。否则将各顶点与最好点的距离平分；收缩复合图形〔如图3-30(d）中的$P_1P_2K_1$〕，重新计算各顶点的目标函数值．按上述步骤搜索新顶点，直到目标函数值最小，即复合形收缩到趋向一点 k^*，即为所求最佳参数序列。

（二）复合形法搜索最优参数程序框图（见图3-31）

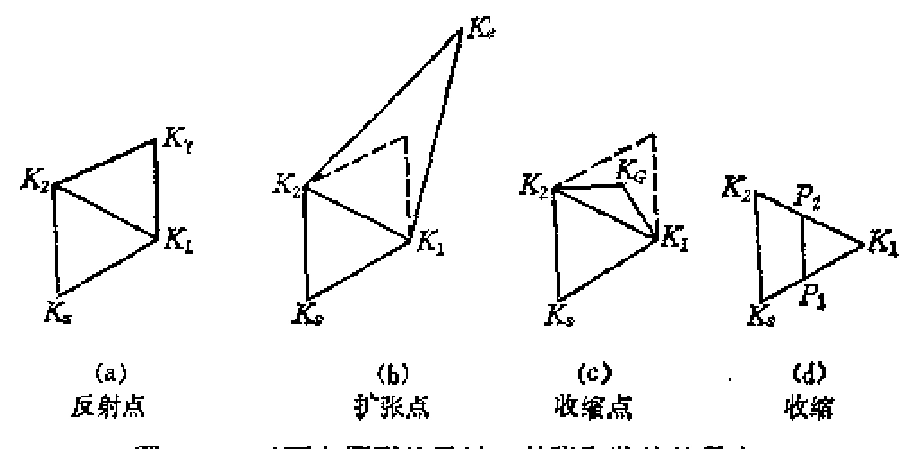


图3-30　三顶点图形的反射、扩张和收缩的示意

【例题3-25】

一均匀稳定河段，采用一维水质数学模型的差分方程。

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial x}=E\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-k_1 c$$

已知水文水质数据如表3-25。流速$u=10\text{km/h}$，用时间步长$\Delta t=0.1$小时，距离步长$\Delta x=1\text{km}$的隐式差分格式和复合形法优选参数E和K_1。

解：设 E的约束条件为 $1<E<3$

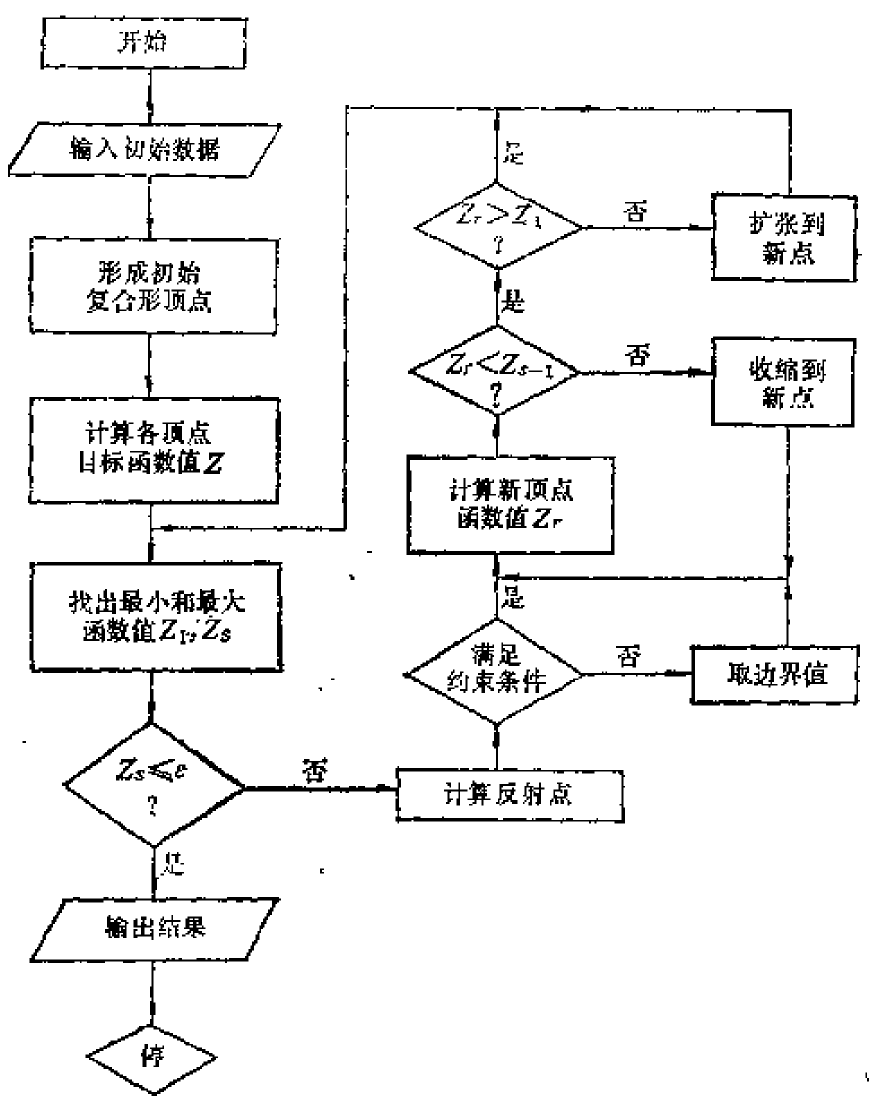


图3-31 复合形法搜索最优参数计算程序框图

表3-25　某河段不同时间 t_i (h)、不同距离 x_i (km) 下测得的污染物浓度 c_i (mg/l)

t_i \ x_i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
c_i	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8
0.0	10	0	0	0	0	0	0	0	0
0.1	10	8.743523	1.274950	0.185908	0.027108	0.003952	0.000576	0.000082	0.000000
0.2	10	9.692543	7.921686	2.104138	0.445201	0.085095	0.015342	0.002613	0.000082
0.3	10	9.900801	9.380238	7.369647	2.656202	0.720933	0.168694	0.035404	0.002609
0.4	10	9.958171	9.782045	9.085949	6.987655	3.033243	0.985370	0.266080	0.035350
0.5	10	9.975910	9.906285	9.651717	8.818388	6.714393	3.295467	1.211394	0.265681
0.6	10	9.981794	9.947493	9.845817	9.515876	8.578607	6.507678	3.452755	1.209578
0.7	10	9.983840	9.961823	9.914742	9.778387	9.378469	8.362368	6.328600	3.447580
0.8	10	9.984577	9.966982	9.939911	9.877913	9.705993	9.245175	8.187724	6.319114
0.9	10	9.984819	9.968888	9.949307	9.916037	9.837856	9.633323	9.137959	8.175451
1.0	10	9.984951	9.969606	9.952873	9.930772	9.890545	9.797129	9.573711	9.124262
1.1	0	8.526825	9.757255	9.923238	9.931984	9.910854	9.864544	9.762315	9.559361
1.2	0	1.083213	7.586553	9.448960	9.841912	9.902354	9.889024	9.840790	9.747682
1.3	0	0.257732	1.805096	6.972709	9.125694	9.732005	9.862181	9.865609	9.826040
1.4	0	0.074645	0.522795	2.299185	6.561409	8.817887	9.602621	9.812938	9.850821
1.5	0	0.023885	0.167284	0.774790	2.647140	6.277812	8.538645	9.468352	9.798229
1.6	0	0.008123	0.056894	0.271018	1.005453	2.899879	6.078800	8.309001	9.454160
1.7	0	0.002879	0.020170	0.097793	0.380528	1.213248	3.093262	5.962665	8.296546
1.8	0	0.001052	0.007369	0.036173	0.145206	0.492191	1.400763	3.256712	5.953727
1.9	0	0.000393	0.002753	0.013635	0.055923	0.197309	0.600494	1.549297	3.251831
2.0	0	0.000149	0.001046	0.005212	0.021701	0.078656	0.249777	0.684915	1.526797

k_1的约束条件为　$0<k_1<0.1$

反射因子α取1.3。取四个复合形顶点，初始值如表3-26。

表3-26　各复合形顶点的参数E和k_1的初始值

顶点号	1	2	3	4
E	0.5	1.0	1.5	2.5
k_1	0.01	0.03	0.05	0.08

收敛精度要求$\varepsilon=10^{-6}$

按计算框图所编计算机程序计算，结果如表3-27，（用表3-25中的前11组数据）

表3-27　各复合形顶点参数E和k_1的计算结果

顶点号	1	2	3	4
E	2.0005213	2.0001958	2.0004715	2.0009600
k_1	0.0149440	0.0149160	0.0150360	0.0149394

第1顶点即为最优顶点，最佳参数为：

$$E^*=2.0005213$$

$$k_1^*=0.0149440$$

结果的检验　（用表3-25中的后10组数据）

把估得的E^*、k_1^*回代模型，以$t=1.1$h的各断面实测值作为起始值，迭代计算出$t=1.2$，1.3，…，2.0h，各断面的浓度值，如表3-28。此模型验证的计算值与表3-25中的后10组（时间从1.1—2.0h）数据非常接近。说明所优选的参数$E^*=2.0005213$和$k_1^*=0.0149440$是可靠和符合实际情况的。

【例题3-26】

一维稳态河口托马方程中的参数估值

1．目标函数和约束条件

（1）目标函数

表3-28　用估得参数E^*、$k_1{}^*$进行水质模拟计算，验证浓度c_i (mg/l)

t_i \ x_i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
t_i \ c_i	c_0	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8
1.1	0	8.526825	9.757255	9.923238	9.931984	9.910854	9.864544	9.762315	9.559361
1.2	0	1.083400	7.586435	9.448930	9.841941	9.902402	9.889076	9.840843	9.747737
1.3	0	0.257819	1.805363	6.972571	9.125640	9.732052	9.862271	9.865712	9.826148
1.4	0	0.074682	0.522955	2.299482	6.561296	8.817822	9.602681	9.813067	9.850980
1.5	0	0.023900	0.167362	0.775010	2.647449	6.277742	8.538584	9.468428	9.798413
1.6	0	0.008130	0.056930	0.271137	1.005718	2.900193	6.078779	8.308966	9.454289
1.7	0	0.002882	0.020185	0.097856	0.380685	1.213549	3.093583	5.962702	8.296559
1.8	0	0.001053	0.007376	0.036200	0.145289	0.492381	1.401093	3.257042	5.953793
1.9	0	0.000393	0.002756	0.013647	0.055964	0.197416	0.600721	1.549648	3.252179
2.0	0	0.000149	0.001047	0.005217	0.021720	0.078710	0.249908	0.685165	1.547334

〔注〕 表中数字下有“——”者为已知值，其他数为模拟计算值。

将一河口分为n段，并认为相邻的n段的特性参数 E_x、k_{1c}、k_{1N}、k_2为同一组定常值。通过实测得污染源分布向量分别为W_B、W_N、W_D，水质分布向量为B^m、N^m、D^m（这里上角m表示实测值）。已知水文数据为断面面积A、体积V、流量Q、段长ΔX，且取$\alpha_{ij}=\beta_{ij}=0.5$ $(j-i=1)$。根据以上数据，当给定一组参数：E_x、k_{1c}、k_{1N}、k_2便可求得托马方程中的系数矩阵G、J、H（参见式2·270、2·271、2·272）。从而便可根据$GB=W_B$、$JN=W_N$、$HD=W_D$方程组解得B^C、N^C和D^C（这里上角c表示模型计算值）。以溶解氧亏为控制指标，得目标函数如下：

$$Z=\|D^c-D^m\|^2 \longrightarrow \min$$

对j次连续测量的数组，目标函数为

$$Z=\sum_j\|D^c-D^m\|^2 \longrightarrow \min \qquad (3\cdot114)$$

（2）约束条件

根据一般文献资料，这些参数的量级分别为

弥散系数　　E_x—— 1 —$10^2 km^2/d$

耗氧系数　　k_{1c}——10^{-1}—$10 d^{-1}$

硝化系数　　k_{1N}——10^{-1}—$10 d^{-1}$

复氧系数　　k_2——$10^{-1} d^{-1}$

故其约束条件可写成

$$0 \leqslant E_x \leqslant 100 \qquad (3\cdot115)$$

$$0 \leqslant k_{1c} \leqslant 50 \qquad (3\cdot116)$$

$$0 \leqslant k_{1N} \leqslant 50 \qquad (3\cdot117)$$

$$0 \leqslant k_2 \leqslant 1 \qquad (3\cdot118)$$

式（3·114）—（3·118）便构成一数学规划问题，可用复合形法求优。

2．数据及计算结果。

本例以某河口数据为基本依据。取六个河段为一组定常参

数

（1）参数数据（已知实际值）

$E_x = 10.3\text{km}^2/\text{d}$；　$k_{1C} = 0.4\ \text{d}^{-1}$；

$k_{1N} = 0.2\ \text{d}^{-1}$；　$k_2 = 0.25\ \text{d}^{-1}$。

（2）水文及污染源数据

$Q(\text{m}^3/\text{d})$	$A(\text{m}^2)$	$\Delta X(\text{m})$	$V(\text{m}^3)$	$W_B(\text{t/d})$	$W_N(\text{t/d})$	$W_D(\text{t/d})$
3.34×10^6	600	6400				
7.4×10^6	1400	6100	6.9×10^3	44	55	10
7.7×10^6	1900	6100	1.03×10^4	4.7	6.7	3.9
7.7×10^6	2300	6100	1.04×10^4	2.5	4.8	1.9
7.8×10^6	2700	6100	1.5×10^4	2.3	2.9	1.2
7.9×10^6	3100	6100	1.8×10^4	2.4	2.3	2.2
8.4×10^6	3960	6100	2.1×10^4	3.7	4.6	2.3

（3）复合形初始值

顶点号	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5	K_6	K_7	K_8
E_x	10	20	30	40	50	60	70	80
k_{1C}	0.8	0.7	0.6	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1
k_{1N}	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
k_2	0.6	0.7	0.8	0.5	0.1	0.2	0.3	0.4

（4）收敛精度　$\varepsilon = 10^{-7}$

（5）用计算机程序计算，结果见表3-29。收敛时最大目标函数值$Z\max = 9\times10^{-8} < 10^{-7}$。最优点为$K_5^*$与所给实际值之间的相对误差均小于$2\times10^{-4}$。

（三）复合形法用于水质模型参数最优估值的评价

复合形法用于一维河流水质差分模型和一维稳态河口有限元水质模型的多参数同时最优估值，有一定效果，从上列两个例题可见方法是可行的。与此相类似，也可把该方法用于二维水质模型的参数估值问题，只是需要解大型的线性方程组。

表3-29　复合形法对河口托马方程参数选优的计算结果

顶点号	E_x	k_{1C}	k_{1N}	k_2
K_1	10.2810910	0.4000045	0.1998771	0.2500180
K_2	10.3032311	0.3995403	0.2003268	0.2500457
K_3	10.3107804	0.3993651	0.2004452	0.2500309
K_4	10.3075647	0.4000375	0.2004990	0.2500465
K_5^*	10.2997707	0.3995068	0.1998839	0.2499847
K_6	10.3074738	0.3995070	0.2003632	0.2500360
K_7	10.3146911	0.3992889	0.2006193	0.2500364
K_8	10.3021413	0.3997469	0.2001953	0.2500315

需要注意的是取得最优解的必要条件是目标函数须具有严格的凸性。建议对所研究的函数在某区间先求得能收敛的某最优值后，需不断改变其搜索区间，若均收敛于同一最优值，说明该函数是凸的，且最优解已求得，否则说明函数是非凸的，对非凸的函数就应把可行域划分为若干凸域，分别求各子域上的最优值，而后加以比较确定整个可行域内的最优值。

参 考 文 献

〔1〕 杉木昭典，水质污染现象及其防止对策，(1974)。

〔2〕 Hugo B. Fischer et al, Mixing of Inland and Coastal Waters, Academic Press, Inc. (1979).

〔3〕 Nemerrow N.L., Scientific Stream Pollution Analysis, McGraw-Hill, Inc. (1974).

〔4〕 Joseph L. Pavani, Handbook of Water Quality Management Planning, Van Nostrand Reinhold Company, (1977).

〔5〕 Rich, L.G., 环境系统工程，水利出版社，(1981)。

〔6〕 S. Rinaldi et al, Modeling and Control of River Quality, Mc Graw-Hill Inc., (1979).

〔7〕 Thomann R.V., Systems Analysis and Water Quality Management, McGraw-Hill, New York, (1972).

〔8〕 高松、内藤、Liang-Sen Fan, 环境システム工学，日刊工业新闻社，(1977)。

〔9〕 Asit K. Biswas, Models for Water Quality Management, McGraw-Hill Inc, (1981)

〔10〕 H.W. Streeter and E.B. Phelps, A Study of the Pollutional and Natural Purification of Ohio River, *Public Helth Bulletin*, No. 146, Feb, (1925).

〔11〕 H.A.J.Thomas, Water and Sewage Works, Vol. 95, 1948.

〔12〕 D.J..Oconnor, Transactions, *ASCE*. Vol. 126, Part Ⅲ, P.556, (1961).

〔13〕 D. P. Loucks, "Water Quality Models for River Systems", Models for Water Quality Management. Edited by A.K. Biswas, (1981).

〔14〕 J. J. McGuirk and D. B. Spalding, "Mathematical Modelling of Thermal Pollution in Rivers", Mathematical Models for Environmental Problems, Edited by C. A. Brebbia, (1976).

〔15〕 E.J. Theriault, *Public Health Bulletin*, 173, (1925).

〔16〕 H.A Jr. Thomas, *Sewage Works Journal*, 9, 224,(1937).

〔17〕 G.A.Rhame, *Water and Sewage Works*, 96, 317, (1949).

〔18〕 H.A.Jr. Thomas, *Water and Sewage Works*, 97, 123, (1950).

〔29〕 A.J.Koivo and G.R. Phillips, *Water Resources Research*, Vol. 8, No.2. PP478-486, (1972).

〔20〕 D.J. Oconnor and W.E.Dobbins, *ASCE Trans*.123, pp641-684, (1958).

〔21〕 M.A.Churchill, H.L. Elmore and K.A. Buckingham, *ASCE J*. 88 (SA 4), 1-46, (1962).

〔22〕 M.Owens, R.W. Edwards and J.W. Gibbs, *Intenat. J. Air Water Pollution*, 8, 469-486, (1964).

〔23〕 W.P. Isacs and A.F. Jr. Gaudy, *ASCE. J*., 88 (SA2), 55-83 (1962)。

〔24〕 P.A. Krenkel and G.T. Orlo,b *ASCE J*., 88(SA2), 53-83, 1962.

〔25〕 J.P. Bonnett and R.E. Rathbun, U.S. Geological Survey Professional Paper, 737, (1972).

〔26〕 E.C. Tsivoglou et al., *J.WPCF*.Vol.40, No. 2, Part I, Feb., (1968).

〔27〕 叶常明等，环境科学，1981年第 2 期。

〔28〕 M.K. Bansal, "Nitrification in Natural Streams," *J. WPCF*. Vol. 48, No. 10, pp2380-2393, (1976).

〔29〕 傅国伟、程声通等，水污染控制系统规划，清大华学出版社，1985.

〔30〕 侯然杰、李惠明，环境科学学报，Vol. 2, No.2, (1982).

〔31〕 杜文涛，"河口数学模型与计算机模拟"，环境科学情报，1984年第一期。

〔32〕 傅国伟、程声通、杜文涛、单开清等 "Thomann 有限单元水质模型在小清河河口水质预测中的应用"，环境污染与防治，Vol, No. (1985.1)。

附录一　某些河流的耗氧系数k_1和复氧系数k_2

$k_1(d^{-1})$	$k_2(d^{-1})$	国　名	河　流　名　称	研　究　者
0.3—0.4	0.05—1.02	美国	威拉米特河(Willamette)	雷维尔(Revelle)
0.5	6.5—8.5	美国	巴格马蒂河(Bagmati)	多维斯(Doris)
0.14—2.10	0.02—0.51	美国	迈尔(Mile)	坎普(Camp)
0.039—5.20	12.0—35.7	美国	霍尔斯顿河(Holston)	基特里尔(Kittrell)
0.32	6.75	美国	圣、安尼奥东(San Antonio)	特克塞斯(Texas)
0.1—0.125	0.12—1.7	美国	俄亥俄(Ohio)	斯特里特(Streeter)
0.05—0.08		美国	梅里迈克(Merrimack)	坎普(Camp)
0.4—0.45	0.1—0.4	美国	特拉华(Delaware)	
0.42—0.98	1.25	英国	特伦特(Trent)	科林奇(Collinge)
0.56	1.25	英国	泰马(Tame)	卡兰德(Garland)
0.17	0.32	英国	卡马(Cam)	比克(Beek)
0.18	1.0	英国	泰晤士(Thames)	伍德(Wood)
0.03—0.2		日本	隅田川	杉木昭典
0.23		日本	寝屋川	杉木昭典
0.72—0.88		日本	淀　川	南部
0.53	0.1	日本	约　特(Yoto)	田村坦之
0.01—1.0	2.0	法国	维埃纳(Vienne)	谢弗伊(Chevereau)
0.19	1.5—2.5	波兰	奥得河(Odra)	马札克(Mamzack)
0.1—2.0	0.01—10.0	联邦德国	内　克(Necker)	哈恩(Hahn)
	0.02—0.043	比列时	桑布尔河(Sambre)	埃德林德(Edeline)
0.15	1.2	以色列	亚历山大(Alexander)	艾菲(Aefi)
0.2	0.3	墨西哥	莱　玛(Lerma)	班克斯(Banks)
0.41—0.87	0.82—1.9	中国	黄河(兰州段)	徐云麟等
0.015—0.13	0.0006—0.07	中国	第一松花江	
0.2—3.45	1.0—4.29	中国	图们江	侯然杰等
0.14—0.26	0.008—1.18	中国	第二松花江(吉林)	
0.1—0.13	0.3—0.52	中国	漓江(象山)	叶常明等
1.0	1.7	中国	渭河(咸阳)	
0.5—1.4	7.0—9.6	中国	丹东大沙河	傅国伟等

〔注〕表中的k_1与k_2的数值均指20℃时的资料。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y = ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q = 4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P = 11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD = 1.5—11.5\ mg/l$；$T = 12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4％；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6％。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction. proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或 $$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction. proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1\,(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或
$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5$ mg/l；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD=1.5—11.5\ mg/l$；$T=12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y = ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q = 4.6—8760\ ft^3/s$（0.129—245 m^3/s）；$P = 11.8—686ft$（3.6—210m）；$BOD = 1.5—11.5\ mg/l$；$T = 12.7—28℃$。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction. proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺³/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或
$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1=10.3Q^{-0.49}$$

或
$$k_1=39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二 耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y = ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中 k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q = 4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P = 11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD = 1.5$—11.5 mg/l；$T = 12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。

附录二　耗氧系数k_1与河流水力学特性的统计关系

1979年莱特（Wright）〔*〕根据美国各地23个河系的36个河段资料，进行多元回归分析，认为耗氧速率k_1与河流流量Q、河道湿周P、水温和河流中的BOD浓度等，具有一定的相关性。采用$y=ax^{-b}$的双曲线形式来表达此关系，经统计回归得：

$$k_1 = 10.3Q^{-0.49}$$

或

$$k_1 = 39.6P^{-0.84}$$

式中　k_1——耗氧系数，d^{-1}

Q——河流流量，英尺^3/秒（ft^3/s）

P——河道湿周，英尺（ft）。

上列两个估算公式，第一式是由44个资料统计得到的，其相关系数为0.926，平均标准差为41.4%；第二式是由35个资料统计得到的，其相关系数为0.914，平均标准差为44.6%。$k_{1(20℃)}$的数值范围为0.08—4.24d^{-1}；$Q=4.6$—8760 ft^3/s（0.129—245 m^3/s）；$P=11.8$—686ft（3.6—210m）；$BOD=1.5$—11.5 mg/l；$T=12.7$—28℃。

注：〔*〕R.M.Wright and A.J. McDonell, In-stream Deoxygenation rate prediction, proc. ASCE. J. Env. Eng. Div. 105, EE2 323-335, (1979)。